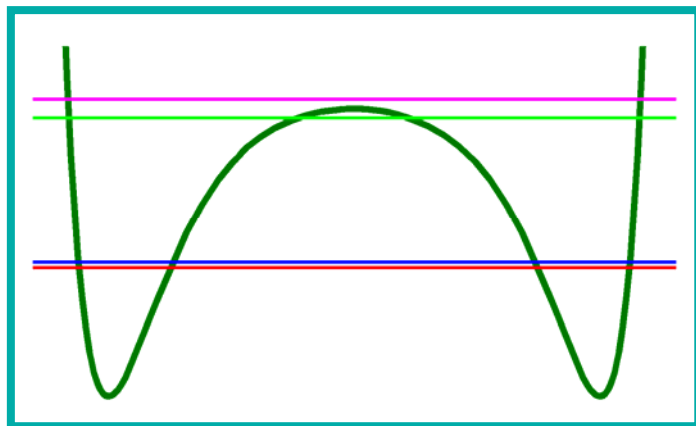


К 200-летию Харьковского университета

В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов

**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ**

Часть первая



Харьков 2012

К 70-летию кафедры теоретической физики
имени академика И.М.Лифшица

В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ

I

АНГАРМОНИЧЕСКИЕ ОСЦИЛЛЯТОРЫ
СТЕПЕННЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ
ТУННЕЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ
ЭНЕРГИИ В НЕСИММЕТРИЧНЫХ
И КРИТИЧЕСКИХ СЛУЧАЯХ
ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ
КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ И
ВАРИАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ
ПОТЕНЦИАЛЫ СПИНОВОГО И
СОЛИТОННОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ
АНИМАЦИОННЫЕ ДЕМОСТРАЦИИ

Харьков 2012

УДК 530.145
ББК 22.314
У 51

Рецензент – доктор физико-математических наук,
профессор А.М.Ермолаев.

У 51 **Ульянов В.В.** Компьютерные исследования квантовых
явлений. Ч. 1/ В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов. Монография. –
Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2012. – 208 с.
ISBN 978-966-623-895-8

Книга продолжает серию монографий и учебных пособий,
приуроченную к 200-летию Харьковского университета и физического
факультета, а также 70-летию кафедры теоретической физики имени
академика И.М.Лифшица.

Рассматриваются различные квантовые явления с помощью
компьютерных методов исследования: аналитических, численных и
графических. Первая часть посвящена связанным стационарным
состояниям. Изучаются особенности степенных потенциалов как
ангармонических осцилляторов, исследуется туннельное расщепление
энергии в несимметричных случаях и критических ситуациях.
Применяются квазиклассические и вариационные методы, а также
численные расчеты и графические представления, включая
анимационные демонстрации. Обсуждаются эффективные потенциалы
спиновой природы и потенциальные поля солитонного
происхождения.

Монография может служить также интерактивным учебным
пособием. Она рассчитана на широкий круг лиц: преподавателей,
научных работников, студентов физических специальностей вузов и
других читателей, интересующихся современными методами
квантовой теории.

К книге прилагается компакт-диск с оригинальными
компьютерными разработками авторов, анимационными
демонстрациями, цветными иллюстрациями и электронными
изданиями книг авторов.

Рекомендовано к печати решением кафедры теоретической
физики имени академика И.М.Лифшица ХНУ имени
В.Н.Каразина (протокол № 3 от 15 февраля 2012 г.)

УДК 530.145
ББК 22.314

ISBN 978-966-623-895-8

© В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов, 2012

ПРЕДИСЛОВИЕ

*Недостаточно только пролететь
над Африкой, надо еще и увидеть ее.*

Жюль Верн

Книга продолжает серию монографий и учебных пособий, приуроченную к 200-летию Харьковского университета и физического факультета, а также 70-летию кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица.

Рассматриваются различные квантовые явления с помощью компьютерных методов исследования: аналитических, численных и графических.

Первая часть посвящена связанным стационарным состояниям. Изучаются особенности степенных потенциалов как ангармонических осцилляторов, исследуется туннельное расщепление энергии в несимметричных случаях и в критических ситуациях. Применяются квазиклассические и вариационные методы, а также численные расчеты и графические представления, включая анимационные демонстрации. Обсуждаются эффективные потенциалы спиновой природы и потенциальные поля солитонного происхождения.

Монография может служить также *интерактивным* пособием. Она рассчитана на широкий круг лиц: преподавателей, научных работников, студентов физических специальностей вузов и других читателей, интересующихся современными методами квантовой теории.

Неотъемлемой частью книги является прилагаемый компакт-диск с оригинальными компьютерными разработками авторов, стендами, анимационными демонстрациями, презентациями с цветными иллюстрациями и электронными версиями авторских книг по квантовой теории.

Благодарим А.М.Ермолаева за постоянную помощь и поддержку.

Январь 2012 года

СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ С ДИСКРЕТНЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ

ВВЕДЕНИЕ

*Вот и отправился Браун с решительным видом в дорогу,
В дальние горы. А путь пролегал по огромной пустыне,
Длинной, широкой, песчаной...*

И.В.Гете («Рейнеке лис»)

Об истории появления этой книги. К концу 1980-х годов, после издания первых трех книг по квантовой теории [А,В,С в Дополнении], у нас появилось желание обобщить собранный к тому времени материал по применению *вычислительных методов в теоретической физике* в виде отдельной монографии. Были оформлены соответствующие документы, получено разрешение на печатание книги, однако в процессе пресловутой перестройки существенно изменились условия публикации. Фактически нужно было издавать книгу за свой счет, а затем заниматься ее распространением. На первое нужны были средства за пределами наших скудных зарплат, а на второе требовались специальные морально-коммерческие навыки для бесплатного «всучивания» своего творения. Так что пришлось отказаться от издания, без надежды когда-либо его осуществить.

Правда, через два десятка лет появилась возможность малотиражных изданий, доступных за личный счет. За это время, однако, существенно изменились наши вычислительные возможности. На смену громоздким ЭВМ с перфокартами пришли в полном смысле слова персональные компьютеры, а также программные вычислительные пакеты, позволяющие производить как аналитические, так и численные расчеты, а также дающие наглядные представления о получаемых результатах в графической форме, включая анимационные

картины. Фактически пришлось делать книгу заново, а старые наработки теперь приводить главным образом в виде исторических иллюстраций. При этом мы *ограничиваемся вопросами, относящимися только к квантовой теории*.

Решено разбить весь имеющийся обширный материал на три части. В первую книгу входят компьютерные исследования *связанных стационарных состояний*: квантовые явления в ангармонических осцилляторах, формируемых на основе степенных симметричных потенциалов, кусочно-степенных потенциалов и других моделей потенциальных полей, квазиклассические и вариационные расчеты физических характеристик, туннельное расщепление энергии в симметричном и несимметричном случаях, а также в критических ситуациях, спиновые эффективные потенциалы и квазиточнорешаемые модели, солитонные потенциалы и обратная задача отыскания вида потенциала по заданному энергетическому спектру, анимационные демонстрации наблюдаемых явлений. Во второй книге предполагается изложить вопросы, связанные со *стационарными состояниями непрерывного энергетического спектра*: существование и вытеснение связанных стационарных состояний, рассеяние, туннелирование, резонансные явления и квазиуровни в различных потенциальных ловушках, а также зонные структуры. Наконец, третья книга должна быть посвящена *кинетическим проблемам*: пакетное движение – слабая нестационарность, переменные внешние воздействия – сильная нестационарность.

Несколько замечаний о том, что, где и как исследуется.

Что исследуется, какие именно явления, эффекты, особенности, свойства, закономерности: энергетический спектр

в целом в заданном потенциальном поле и особенно основной уровень энергии (нулевые колебания, вакуумное состояние), изменение структуры энергетического спектра с увеличением энергии, а также при деформации потенциала, величины энергетических щелей при туннельном расщеплении в двухъямных потенциальных полях (особенно в случае несимметричных потенциальных полей и в критических ситуациях расположения щели вблизи максимума барьера, разделяющего потенциальные ямки), волновые функции связанных стационарных состояний и плотность вероятности координат, вероятность нахождения в классически недоступных областях движения, средние значения физических характеристик в стационарных состояниях, в частности неопределенность координаты как мера амплитуды колебаний и величина произведения неопределенностей координаты и импульса (особенно для основного состояния).

Где исследуется: одномерные эффективные потенциальные поля, получаемые при разделении переменных в реальных условиях движения квантовых частиц с квадратичным законом дисперсии. Потенциальные модели, допускающие простые точные *явные* решения для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний. Модели с точными *неявными* решениями для энергетических уровней, которые можно получить решением характеристических (алгебраических или трансцендентных) уравнений с помощью приближенных или численных расчетов. Потенциалы, для которых возможно только приближенное или численное решение. Модели потенциалов могут быть самыми разнообразными: однопрофильные (среди которых преобладают степенные), разнопрофильные (кусочно-степенные), симметричные и

несимметричные (одно- и разностепенные). Потенциалы с граничными условиями непроницаемости (обращение в ноль волновой функции на границе движения) и потенциалы с граничными условиями обращения в ноль производной волновой функции. Потенциалы спиновой природы и солитонные потенциалы с произвольно задаваемыми уровнями энергии.

Как исследуется: квазиклассические и вариационные методы, теория возмущений, когда вначале используются аналитические преобразования, а на заключительной стадии включаются численные расчеты, численные решения дифференциального уравнения Шредингера в координатном представлении (метод стрельбы и дихотомия), численные способы матричного подхода для собственных значений гамильтониана в удобном представлении (метод диагонализации «усеченной» матрицы). Результаты обычно представляются в виде таблиц и в графической форме, включая анимационные картины. Они получены с помощью оригинальных авторских программных разработок на основе прикладных компьютерных приложений, включая пакет Mathematica.

Первый том мы разбили на четыре раздела. В первом разделе «Ангармонические квантовые осцилляторы» рассматриваются физические системы в условиях, когда движение квантовых частиц описывается потенциальными полями, моделируемыми степенными структурами. Излагаются общие результаты по изучению подобных систем численными методами решения уравнения Шредингера, а также приведены расчеты приближенными аналитико-численными методами

(квазиклассическое приближение, вариационные методы, теория возмущений). Особое внимание уделено типичным представителям ангармонических систем – четверному осциллятору и линейному потенциалу. Рассматриваются различные примеры нестандартных симметричных и несимметричных моделей потенциальных полей.

Во втором разделе «Туннельное расщепление энергии» проведены исследования типично квантового явления возникновения энергетических щелей в условиях, моделируемых двухъямными потенциальными полями. При этом наше внимание сосредоточено на двух нетрадиционных теоретических вопросах: расчеты расщепления уровней энергии в *несимметричных потенциалах* и в *критических ситуациях*, когда расщепляемая энергия сравнивается с вершиной потенциального барьера в двухъямном поле.

Третий раздел «Спиновые эффективные потенциалы» посвящен новым квантовым объектам, возникшим при исследовании магнитных свойств так называемых спиновых систем. Здесь обнаружены *новые для квантовой теории ситуации*, когда эффективные потенциальные поля, описывающие спиновые системы, одновременно становятся носителями необычных структур энергетического спектра – с наличием простых явных точных решений для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний в некотором конечном интервале значений энергии. Это явление получило название *квазиточнорешаемости*, а соответствующие потенциальные поля – квазиточнорешаемых моделей. Эти объекты особенно интересны тем, что отличаются *многопрофильностью* за счет нескольких изменяющихся параметров (дискретных и непрерывных), связанных со спиновыми и магнитными характеристиками ассоциированных с

ними физических систем. Интересные примеры таких моделей симметричного и несимметричного вида и составляют предмет нашего компьютерного изучения.

Наконец, четвертый раздел «Солитонные потенциальные поля» содержит еще одно необычное для квантовой механики направление – построение потенциальных полей на основе *произвольно задаваемых* уровней энергии, т. е. мы сталкиваемся здесь с *обратной задачей* нахождения потенциала и волновых функций стационарных состояний по уровням энергии. Солитонные потенциалы имеют много общего со спиновыми потенциалами. Элементы такой аналогии выделены в отдельный подраздел, тогда как основное внимание сосредоточено на тех многочисленных и многопараметрических потенциальных полях, которые предоставляет подход, связывающий ветвь теории нелинейных явлений – солитоны уравнения Кортевега-де Фриза – с квантовомеханической теорией движения в частиц в потенциальных полях.

Часть результатов исследований в виде таблиц, а также некоторые вспомогательные материалы вынесены в Приложения в конце первой книги.

Нужно еще и еще раз подчеркнуть, что прилагаемый к книге компакт-диск является неотъемлемой, важнейшей составляющей монографии, поскольку содержит конкретные авторские компьютерные разработки, реализующие *интерактивное исследовательское общение*. В частности, там имеется достаточно много *анимационных* демонстраций. Они отражают изменения физических характеристик изучаемых систем в зависимости от некоторых параметров. Анимации другого типа, которые моделируют во времени реальные процессы, происходящие в физической системе, будут представлены в приложениях к третьему тому книги.

1. АНГАРМОНИЧЕСКИЕ КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯТОРЫ

Приходится ограничиться одной группой явлений, в исследовании которых физики достигли наибольших успехов и логика происходящих событий проявляется наиболее ярко.

Я.А.Сморodinский

Для одномерных систем, совершающих колебания, обычно используют разложение потенциальной энергии вблизи ее минимума, ограничиваясь квадратичным приближением. Так возникает задача о гармоническом осцилляторе, у которого в классическом описании главной особенностью является независимость периода колебаний от энергии, а в квантовом – эквидистантность энергетического спектра. Для такой системы и уровни энергии, и волновые функции стационарных состояний получаются аналитически в простом явном виде. Далее идет учет следующих членов разложения потенциала на основе теории возмущений, т. е. ангармонизмов, играющих роль поправок. Однако с ростом энергии считать ангармонизмы малыми в некоторых случаях уже нельзя, так что требуется иной подход (например, квазиклассическое приближение).

Все сказанное касается систем с потенциалом, имеющим минимум второго порядка. Однако для потенциала с неквадратичным минимумом даже при малых колебаниях движение существенно отличается от гармонического.

1.1. Степенные потенциальные поля

*– Каковы ваши намерения, сэр? –
обратился капитан к Гленарвану.
Жюль Верн*

Именно к таким системам **с сильным ангармонизмом** и относятся степенные осцилляторы. Поскольку такие системы не имеют простых явных решений для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний, необходимо использовать методы приближенных расчетов (квазиклассическое приближение, вариационный метод, теорию возмущений, оценку на основе соотношения неопределенностей и другие способы) или численные методы решения стационарного уравнения Шредингера.

Нужно подчеркнуть одну важную особенность степенных симметричных осцилляторов: их потенциал является нуль-параметрическим (для данного показателя степени), его профиль фиксирован, все его характеристики обсчитываются раз и навсегда, т. е. результаты получаются однажды и иллюстрируют характерные квантовые явления, присущие подобным моделям.

На примере степенных осцилляторов демонстрируются и отрабатываются способы численных и аналитических приближенных расчетов для дальнейшего приложения к другим квантовым системам.

Итак, рассматриваются случаи движения квантовых частиц с квадратичным законом дисперсии и массой m в одномерных эффективных степенных симметричных потенциальных полях

$$U(x) = \beta |x|^v. \quad (1.1)$$

Соответствующее уравнение Шредингера для стационарных состояний в координатном представлении имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0. \quad (1.2)$$

Здесь и в дальнейшем мы будем пользоваться безразмерными физическими характеристиками, в частности величинами координаты z и энергии ε (или e), вводимыми следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} z = x(2m/\hbar^2)^{1/(2+v)} \beta^{1/(2+v)} \\ \varepsilon = E(2m/\hbar^2)^{v/(2+v)} \beta^{-2/(2+v)} \end{array} \right\}. \quad (1.3)$$

Тогда уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + [\varepsilon - u(z)]\psi = 0, \quad (1.4)$$

где степенные симметричные потенциалы

$$u(z) = |z|^v, \quad (1.5)$$

а гамильтониан таких систем в z -представлении $\hat{h} = \hat{p}_z^2 + |z|^v$.

1.2. Численные методы решения уравнения Шредингера

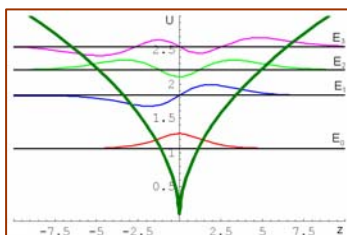
*– Тут цифры, господа! – воскликнула Элен.
Жюль Верн*

На рис. 1 представлены некоторые примеры таких степенных симметричных потенциальных полей с соответствующими графиками профилей потенциалов, уровней энергии для основного и трех возбужденных стационарных состояний, а также соответствующие волновые функции в этих состояниях. Эти результаты получены нами при численном решении уравнения Шредингера (1.4) способом стрельбы с методом половинного деления (дихотомией).

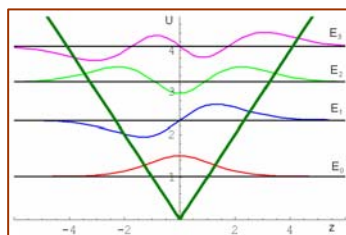
На рис. 2 дополнительно показан ангармонический осциллятор с достаточно большим показателем степени $\nu = 100$.

Далее нас будут интересовать как общие глобальные особенности движения квантовых частиц в таких степенных полях, так и некоторые локальные. Все это на двумерной координатной сетке: по горизонтали, т. е. вдоль оси абсцисс с показателем степени ν , и по вертикали, т. е. по оси ординат с энергетическими уровнями, нумеруемыми квантовым числом возбуждений n (см. рис. 3).

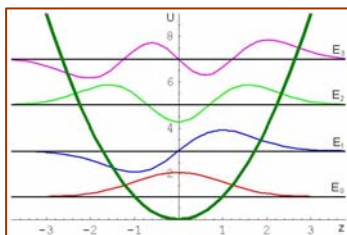
В таблице на стр. 16 сведены результаты численных расчетов уровней энергии основного и первых трех возбужденных стационарных состояний для некоторых симметричных степенных осцилляторов.



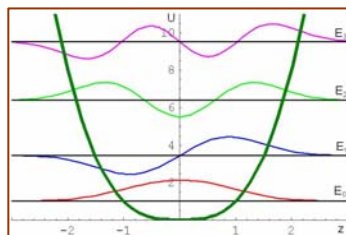
$\nu = 1/2$



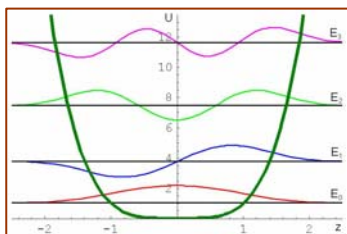
$\nu = 1$



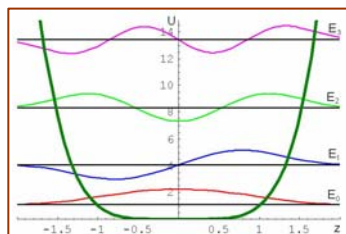
$\nu = 2$



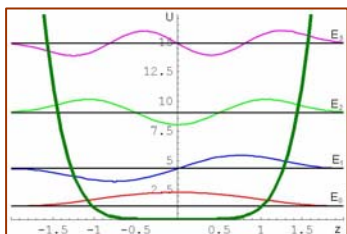
$\nu = 3$



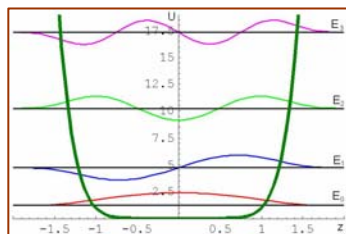
$\nu = 4$



$\nu = 5$



$\nu = 6$



$\nu = 8$

Рис. 1. Степенные симметричные потенциалы $U(z) = |z|^\nu$.

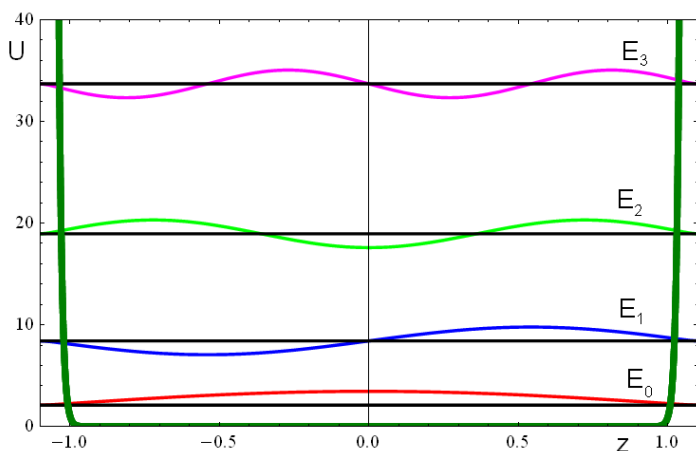


Рис. 2. Степенной симметричный потенциал с $\nu = 100$.

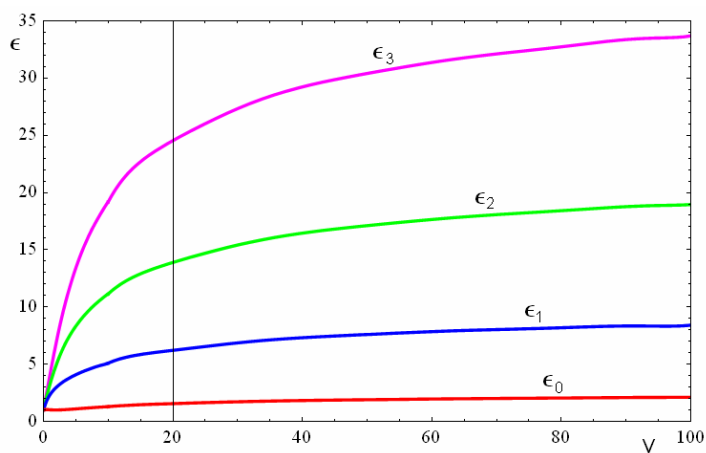


Рис. 3. Двумерное представление о поведении основного и трех возбужденных уровней энергии для степенных симметричных осцилляторов в области значений показателя степени $0 < \nu < 100$.

Таблица уровней энергии некоторых степенных
симметричных потенциалов $u(z) = |z|^v$

v	e_0	e_1	e_2	e_3
1	1.018792972	2.338107415	3.248197857	4.087957384
2	1.000000000	3.000000000	5.000000000	7.000000000
3	1.022947876	3.450562691	6.370293227	9.522076570
4	1.060362090	3.799673029	7.455697938	11.64474551
5	1.102297464	4.089159315	8.337675368	13.42709301
6	1.144802454	4.338598712	9.073084561	14.93516963
7	1.186287467	4.559129903	9.702029726	16.23169245
8	1.225820114	4.755874414	10.24494698	17.34308797
9	1.263379580	4.934581883	10.72537582	18.32206899
10	1.298843701	5.097876529	11.15431820	19.18880956
20	1.560508343	6.219360529	13.91315827	24.54991290
30	1.718965418	6.867189367	15.41960623	27.33740380
40	1.825761608	7.298830316	16.40684632	29.13013060
50	1.903191113	7.610399982	17.11464367	30.40464110
60	1.962232590	7.847471914	17.65140871	31.36694436
70	2.008934731	8.034775950	18.07465950	32.12389293
80	2.046919524	8.187008906	18.41827407	32.73743595
90	2.078496620	8.314555560	18.70357375	33.24632952
100	2.105213774	8.420493749	18.94476071	33.67623189

На шкале показателя степени ν для рассматриваемых степенных симметричных потенциалов можно отметить 7 особых точек.

Прежде всего, $\nu = 2$. Это замечательный случай гармонического, параболического, квадратичного потенциала – единственный среди симметричных потенциалов, имеющий простые явные точные аналитические выражения для уровней энергии (линейная зависимость от квантового числа – эквидистантность спектра энергии) и волновых функций стационарных состояний (функции Эрмита – гауссова весовая функция и полиномы Эрмита).

Далее отметим линейный потенциал с $\nu = 1$, для которого также имеются точные аналитические решения (функции Эйри), однако для уровней энергии нет явных формул, так что нужно еще решать соответствующие уравнения (искать нули функций Эйри и их производных).

Затем – важный случай четверного осциллятора с $\nu = 4$, соответствующий потенциальным полям с минимумом четвертого порядка. Для него необходимо искать значения уровней энергии и волновых функций стационарных состояний

приближенными аналитическими методами или численным решением стационарного уравнения Шредингера.

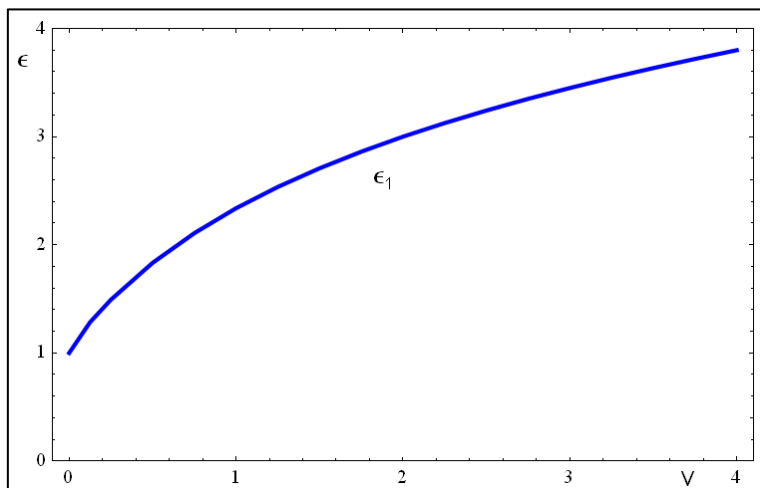
Добавим предел $\nu \rightarrow \infty$, когда $|z|^\nu \rightarrow 0$ при $|z| < 1$ и $|z|^\nu \rightarrow \infty$ при $|z| > 1$, т. е. степенные потенциалы превращаются в прямоугольную потенциальную яму бесконечной глубины и ширины, равной 2 (в выбранном нами универсальном масштабе безразмерных величин), так что уровни энергии приближаются к значениям $e_n = \pi^2(n+1)^2/4$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Рис. 2 демонстрирует такую тенденцию.

Есть также предел $\nu \rightarrow 0$, когда $|z|^\nu \rightarrow 1$ при $|z| \neq 0$, так что все уровни энергии стремятся к значению 1.

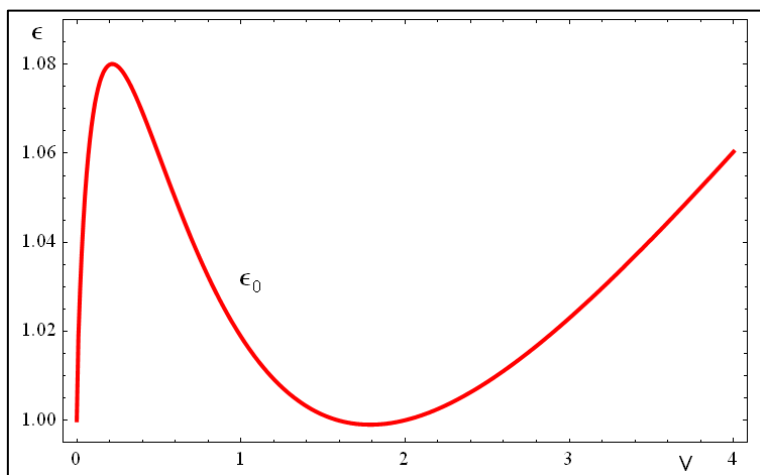
Наконец, следует отметить любопытный *немонотонный характер поведения нулевой энергии* в диапазоне значений ν между 0 и 2. Здесь имеются еще две интересные точки: минимум энергии вблизи $\nu = 2$ с $e_{0\min} = 0.999$ при $\nu_{\min} = 1.79$ и максимум вблизи $\nu = 1$ с $e_{0\max} = 1.08$ при $\nu_{\max} = 0.216$ (округляем численные величины до трех верных знаков).

Заметим, что энергии возбужденных состояний изменяются монотонно.

На графиках рис. 4 отражены указанные особенности.



1



2

Рис. 4. Энергия основного и первого возбужденного стационарных состояний степенных симметричных осцилляторов для небольших значений показателей степени.

Разумеется, особое внимание будет уделяться трем главным опорным точкам: $\nu = 1$, $\nu = 2$ и $\nu = 4$.

Мы использовали три способа численных расчетов для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний: решение дифференциального уравнения Шредингера в координатном представлении (уже упомянутый метод стрельбы с дихотомией) и методы диагонализации усеченной матрицы гамильтониана в представлениях гармонического осциллятора и бесконечной прямоугольной ямы. Эти три способа взаимно дополняют друг друга и позволяют контролировать получаемые численные результаты с достаточно большой точностью. Приложение 1 и Приложение 2 содержат результаты наших численных расчетов для четверного и линейного потенциалов (уровни энергии, средние значения квадрата координаты, вероятности проникновения в неклассические области, произведения неопределенностей (ПН) координаты и импульса).

В специальном приложении на компакт-диске имеются анимационные демонстрации изменений характеристик степенных потенциалов в зависимости от показателя степени ν .

Перейдем к изучению некоторых физических характеристик в стационарных состояниях ангармонических осцилляторов. Мы начнем с вычисления средних значений квадратов координаты,

которые одновременно являются дисперсиями, так как средние значения координат для симметричных потенциалов в стационарных состояниях равны нулю. Такие расчеты проведены одновременно с нахождением уровней энергии и соответствующих волновых функций. Результаты приведены на графиках рис. 5, а также содержатся в таблицах данных для четверного и линейного потенциалов (Приложения 1 и 2).

Используем найденные дисперсии координат и уровни энергии для вычисления произведения неопределенностей (ПН) импульса и координаты $\Delta p_n \Delta z_n$ в стационарных состояниях. В силу вириальных соотношений $\langle p^2 \rangle_n = \frac{v}{v+2} \varepsilon_n$, а согласно теореме Эренфеста в стационарных состояниях $\langle p \rangle_n = 0$, так что для произведения дисперсий получаем соотношение

$$D_p D_z = \frac{v}{v+2} \varepsilon_n \langle z^2 \rangle_n, \text{ а для ПН}$$

$$\Delta p_n \Delta z_n = \sqrt{\frac{v}{v+2} \varepsilon_n \langle z^2 \rangle_n}. \quad (1.6)$$

Наибольший интерес представляет поведение ПН в основном состоянии. В силу соотношения неопределенностей

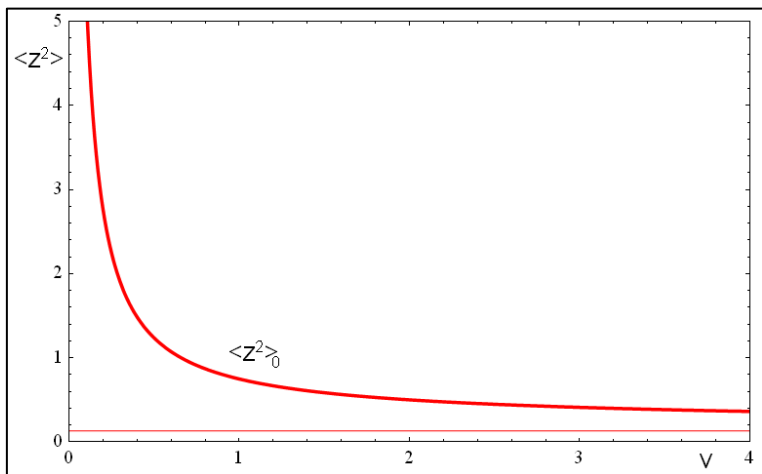
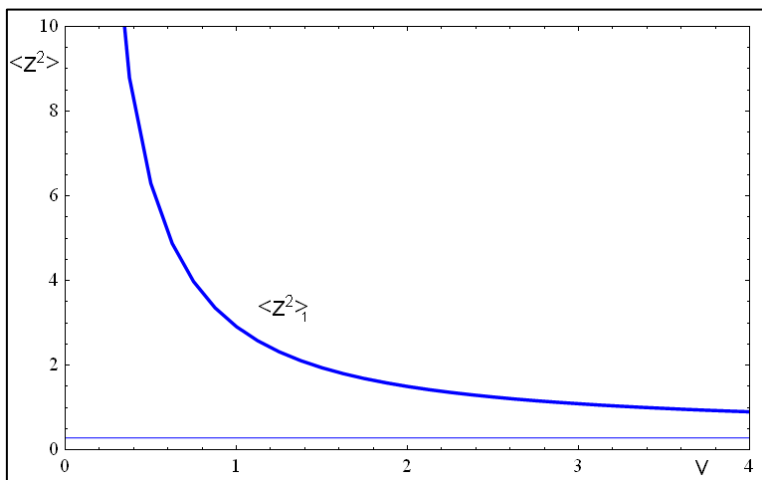


Рис. 5. Дисперсия координаты степенных осцилляторов в основном и первом возбужденном состояниях. Горизонтальные линии соответствуют пределам при $\nu \rightarrow \infty$.

Гейзенберга в любом состоянии $\Delta p \Delta z \geq 1/2$ (напоминаем, что используются безразмерные величины), так что любопытно сопоставить фактические значения ПН с принципиально наименьшим их значением $1/2$. Известно, что этот минимум достигается при нулевых колебаниях гармонического осциллятора. Поэтому сравним с ним другие осцилляторы. Расчеты приводят к такому поведению ПН в основном состоянии, который отражен на нижнем графике рис. 6.

Нужно отметить, что для всех показателей степени осцилляторов ПН не очень далеко отходят от своего минимума $1/2$. В частности, можно рассмотреть предельное значение ПН при $v \rightarrow \infty$, когда потенциал превращается в прямоугольную яму бесконечной глубины и ширины 2. В этом случае

$$\langle p^2 \rangle_n = \varepsilon_n = \frac{\pi^2 (n+1)^2}{4}, \quad \text{а} \quad \langle z^2 \rangle_n = \frac{1}{3} - \frac{2}{(n+1)^2 \pi^2}. \quad \text{Таким}$$

образом, ПН равны

$$\Delta p_n \Delta z_n = \frac{\pi(n+1)}{2\sqrt{3}} \sqrt{1 - \frac{6}{(n+1)^2 \pi^2}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.7)$$

В частности, для нулевых колебаний

$$\Delta p_0 \Delta z_0 = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \sqrt{1 - \frac{6}{\pi^2}} = 0.567862. \quad (1.8)$$

Именно к такому пределу мы наблюдаем стремление ПН на графике рис. 6.

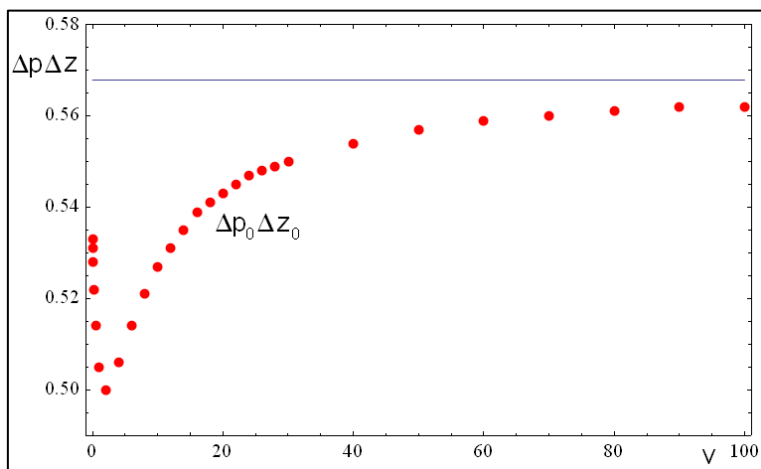
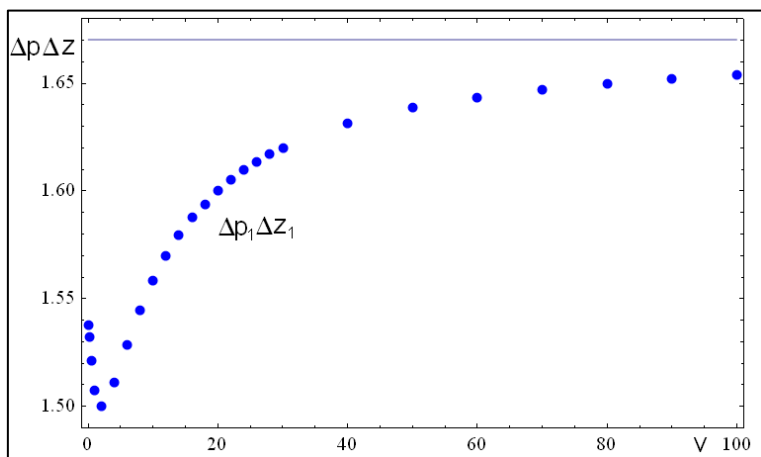


Рис. 6. Произведение неопределенностей импульса и координаты степенных осцилляторов в основном и первом возбужденном состоянии.

$$\text{Для четверного осциллятора} \quad \Delta p_0 \Delta z_0 = 0.505882, \quad (1.9)$$

$$\text{а для линейного потенциала} \quad \Delta p_0 \Delta z_0 = 0.504635. \quad (1.10)$$

Любопытно, что в возбужденных состояниях поведение ПН подобно тому, что наблюдается для основного состояния. Так, картина на верхнем графике рис. 6 подобна нижней, хотя нет оснований заранее предполагать, что в возбужденном состоянии будет реализоваться минимум при $v=2$.

Теперь перейдем к еще одной чисто квантовой особенности рассматриваемых систем — вероятности нахождения в неклассической области движения. Ясно, что для каждого стационарного состояния с ростом показателя степени осциллятора такая вероятность должна убывать, так как при стремлении к бесконечно глубокой яме прямоугольного профиля хвосты распределения плотности вероятностей координат исчезают. Можно ожидать и убывания вероятности с ростом номера возбуждения для данного осциллятора, так как с увеличением энергии движение приобретает классический характер. Однако оказывается, что здесь имеются некоторые сюрпризы. Перейдем к численным расчетам. Результаты приведены на рис. 7 для основного и первого возбужденного стационарных состояний. Видно, что при некотором значении показателя степени ($v \approx 5.5$) «внеклассические» вероятности для

возбужденного состоянии начинают превалировать над таковыми для основного состояния. Такой вот несколько парадоксальный результат.

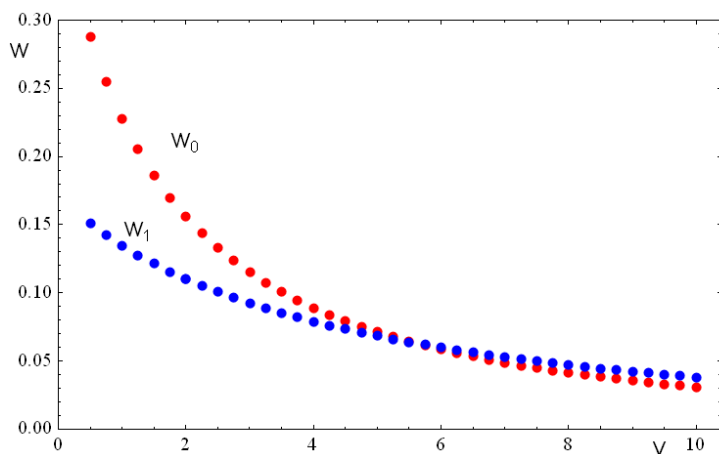


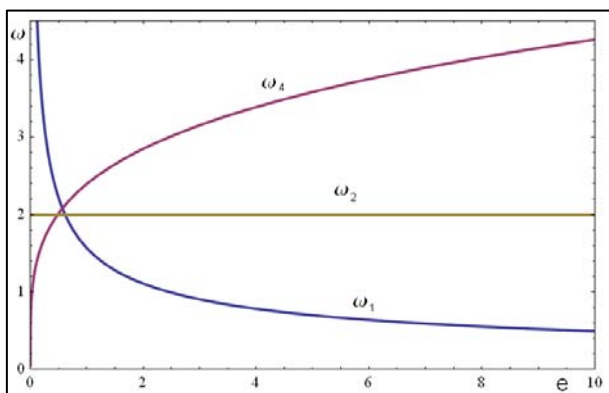
Рис. 7. Поведение вероятностей нахождения в неклассической области движения для основного и первого возбужденного стационарных состояний симметричных степенных осцилляторов.

Добавим еще одну характеристику структуры энергетического спектра в целом. Как известно, расстояния между уровнями энергии определяются классической частотой колебаний (при отсутствии особенностей потенциала). Интересно сопоставить зависимость этой частоты от энергии с фактическими расстояниями между соседними уровнями в

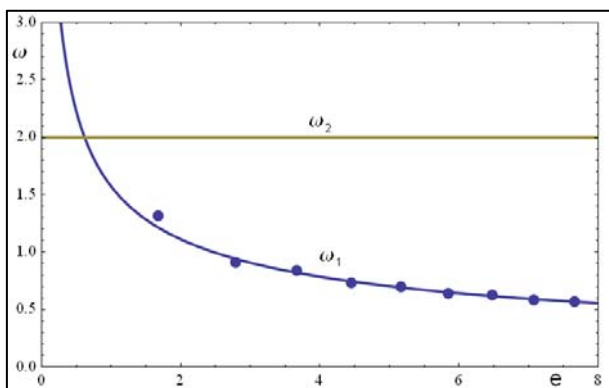
спектре степенных симметричных осцилляторов. На графиках рис. 8 представлены результаты такого сравнения для линейного, квадратичного и четверного потенциалов. Разумеется, для квадратичного осциллятора с его эквидистантным спектром имеется полное совпадение при всех значениях энергии, тогда как для двух других случаев получаем весьма близкие результаты уже для расстояний, начиная со второго, т. е. $e_2 - e_1$. На графиках рис. 8 (2-3) точками откладываются значения $e_{n+1} - e_n$ в зависимости от $(e_{n+1} + e_n)/2$, а верхний график объединяет кривые классических частот колебаний для этих трех осцилляторов.

Далее мы приводим результаты расчетов приближенными методами: используются квазиклассические правила квантования энергии в первом, втором и третьем приближениях, три варианта пробных функций при вариационном методе оценки основного и первого возбужденного уровней энергии, а также специальные вариационные способы оценки уровней энергии при больших и малых значениях показателя степени рассматриваемых потенциальных полей.

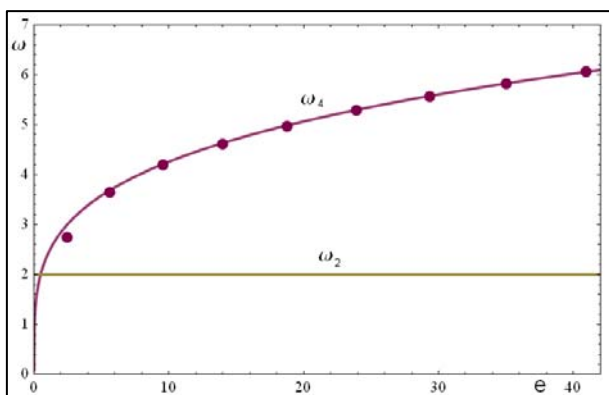
Особая проблема возникает при вариационной оценке второго и последующих возбужденных уровней энергии, однако квазиклассические расчеты в этих случаях дают прекрасные результаты, так что можно ограничиться вариационной оценкой



1



2



3

Рис. 8. Оценка расстояния между уровнями энергии степенных осцилляторов (линейного, квадратичного и четверного) с помощью классической частоты колебаний.

энергии только для основного и первого возбужденного стационарных состояний.

Упомянем и о локальных расчетах по теории возмущений для окрестностей $\nu \sim 2$ и $\nu \sim 1$.

Проведено сопоставление различных методов расчетов и оценка эффективности квазиклассики и варьирования.

Добавим общее замечание о графиках на рисунках: численные результаты мы изображаем либо сплошными линиями, либо крупными точками. Последний способ удобен, когда нужно сравнить точные ответы с приближенными, которые рисуются штриховыми, штрихпунктирными, пунктирными или тонкими сплошными линиями и очень близки к точным: нужно, чтобы они были видны на фоне точных, а не заслонялись сплошными линиями. Кроме того, крупные точечные изображения численных ответов выступают в роли истинных, «экспериментальных» данных по отношению к аппроксимациям.

Отметим, что в электронной версии монографии, а также в прилагаемых презентациях, стендах и анимационных демонстрациях рисунки даются в цвете. Причем мы будем изображать величины в основном стационарном состоянии красным цветом, в первом возбужденном – синим, во втором – зеленым, в третьем – фиолетовым и т. д.

1.3. Квазиклассическое приближение

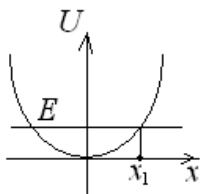
– Спокойно проведя ночь, путешественники
наутро вновь пустились в путь.

Жюль Верн

Первое квазиклассическое приближение для энергии реализуется правилом квантования Бора-Зоммерфельда [1, 2]

$$\oint p dx = h(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.11)$$

где постоянная Планка $\hbar = h/2\pi$ и импульс частицы $p = \sqrt{2m[E - U(x)]}$, а интеграл соответствует классическому периоду колебаний.



Для симметричных потенциалов $U(-x) = U(x)$ правило квантования сводится к

уравнению $4 \int_0^{x_1} \sqrt{2m[E - U(x)]} dx = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2})$, в

котором x_1 – классическая точка поворота. В случае степенных симметричных осцилляторов в безразмерных переменных (1.3) оно принимает вид

$$4 \int_0^{\frac{1}{\varepsilon^v}} \sqrt{\varepsilon - z^v} dz = 2\pi(n + \frac{1}{2}). \quad (1.12)$$

Делая замену переменной интегрирования $z = (\varepsilon y)^{1/v}$,

преобразуем интеграл к виду $\frac{4}{v} \varepsilon^{\frac{v+2}{2v}} \int_0^1 (1-y)^{\frac{3}{2}-1} y^{\frac{1}{v}-1} dy$

Используя определение бета-функции Эйлера

$$B(a, b) = \int_0^1 t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt, \text{ получаем}$$

$$\int_0^1 (1-y)^{\frac{3}{2}-1} y^{\frac{1}{v}-1} dy = B\left(\frac{1}{v}, \frac{3}{2}\right),$$

а в силу связи бета-функции с гамма-функциями

$$B(a, b) = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} \text{ имеем} \quad B\left(\frac{1}{v}, \frac{3}{2}\right) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{v}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2} + \frac{1}{v}\right)}.$$

На основе свойств гамма-функции $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ и $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$

получаем

$$B\left(\frac{1}{v}, \frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{1}{v}\right)}{\frac{v+2}{v}\Gamma\left(\frac{v+2}{2v}\right)},$$

а для уровней энергии в первом квазиклассическом приближении приходим к простой явной формуле

$$\varepsilon_n^{(1)} = \left[\frac{\sqrt{\pi}(v+2)}{2} \frac{\Gamma\left(\frac{v+2}{2v}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{v}\right)} \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^{\frac{2v}{v+2}}. \quad (1.13)$$

Сразу отметим, что в случае квадратичного потенциала, т. е. при $v=2$, полученная формула первого квазиклассического приближения (1.8) дает известный точный результат

$$\varepsilon_n = 2n+1, \quad n=0,1,2,\dots \quad (1.14)$$

Подчеркнем, что именно так выглядит привычное выражение для гармонического осциллятора $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ в случае введения безразмерных величин согласно (1.3).

Для четверного осциллятора формула (1.8) сводится к

выражению $\varepsilon_n^{(1)} = \left[3\sqrt{\pi} \frac{\Gamma(\frac{3}{4})}{\Gamma(\frac{1}{4})} (n + \frac{1}{2}) \right]^{\frac{4}{3}}$, что в силу соотношения

для гамма-функции $\Gamma(1-x)\Gamma(x) = \frac{\pi}{\sin(\pi x)}$ дает

$$\varepsilon_n^{(1)} = \left[\frac{3\pi\sqrt{2\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} (n + \frac{1}{2}) \right]^{\frac{4}{3}}, \text{ или в явном численном}$$

виде $\varepsilon_n^{(1)} = 2.18507(n + \frac{1}{2})^{4/3}$. (1.15)

В частности, энергия основного состояния $\varepsilon_0^{(1)} = 0.867145$, что достаточно близко к точному значению $\varepsilon_0 = 1.06036$. Относительная ошибка составляет $\delta_0^{(1)} = 18\%$.

Для линейного потенциала аналогичным образом получаем

$$\varepsilon_n^{(1)} = \left[3\frac{\pi}{4} (n + \frac{1}{2}) \right]^{\frac{2}{3}}, \text{ или численно в используемом}$$

приближении $\varepsilon_n^{(1)} = 1.77068(n + 1/2)^{2/3}$. (1.16)

В частности, $\varepsilon_0^{(1)} = 1.11546$, что также достаточно близко к точному значению $\varepsilon_0 = 1.01879$. Относительная ошибка составляет $\delta_0^{(1)} = -9.5\%$.

Добавим, что при $\nu \rightarrow 0$ все уровни энергии первого квазиклассического приближения (1.8) удовлетворяют точному условию $\varepsilon_n \rightarrow 1$, тогда как при $\nu \rightarrow \infty$ получаем

$\varepsilon_n^{(1)} \rightarrow \frac{\pi^2}{4}(n+1/2)^2$. Такой результат отличается от истинного уже упомянутого предела $\varepsilon_n \rightarrow \frac{\pi^2}{4}(n+1)^2$. Это соответствует

тому обстоятельству, что вместо половинного квантования в формуле (1.6) для случая непроницаемых границ нужно заменить $1/2$ на добавку γ , которая учитывала бы такой переход от плавных граничных условий для потенциалов с небольшими значениями показателя степени ν с $\gamma = 1/2$ к резким границам для потенциалов с большими ν , когда $\gamma = 1$.

Наконец, сравним графически получаемые с помощью формулы первого квазиклассического приближения ответы для энергии основного состояния (1.8) с численными значениями.

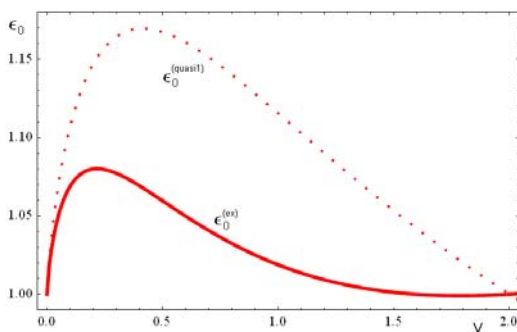


Рис. 9. Сопоставление энергии основного состояния в первом квазиклассическом приближении с точным значением в интервале показателей степени $0 < \nu < 2$.

Видно, что результат первого квазиклассического приближения удовлетворителен, даже есть попытка передать немонотонный характер поведения нулевой энергии в этом интервале показателя степени. Добавим еще одну иллюстрацию этому в более широком диапазоне показателей степени потенциалов и в ином масштабе.

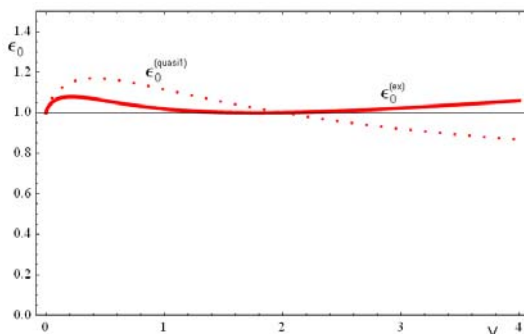


Рис. 10. Сравнение энергии основного состояния в первом квазиклассическом приближении с точным значением в интервале показателей степени $0 < \nu < 4$.

Конечно, ожидать высокой точности от квазиклассики для основного состояния не следовало бы, однако оказывается, что даже в указанных интервалах показателя степени относительные ошибки оказываются достаточно малыми. Более подробно вопрос о применимости квазиклассического приближения для нулевой энергии и о конкретных результатах таких расчетов обсуждается в монографии [3].

Воспользуемся одной возможностью уточнения первого квазиклассического приближения для основной энергии за счет включения в правило квантования (1.6) уже упоминавшейся фазовой добавки γ , изменяющейся от обычного значения $1/2$ для плавных потенциалов к 1 для потенциалов, близких к прямоугольной яме бесконечной глубины. Тогда формулу (1.8)

запишем в виде

$$\varepsilon_n^{(1)} = \left[\frac{\sqrt{\pi}(v+2)}{2} \frac{\Gamma(\frac{v+2}{2v})}{\Gamma(\frac{1}{v})} (n+\gamma) \right]^{\frac{2v}{v+2}}, \quad (1.17)$$

а для фазовой добавки используем интерполяционное

выражение

$$\gamma = 1 - \frac{1}{2} [f(0) - f(q)] / [f(0) - f(1/2)],$$

$$f(q) = 1/(1+9q-5q^2), \quad q = 1/v. \quad (1.18)$$

Это позволяет аппроксимировать уровни энергии также и при больших значениях показателя степени v , что демонстрирует рис. 11.

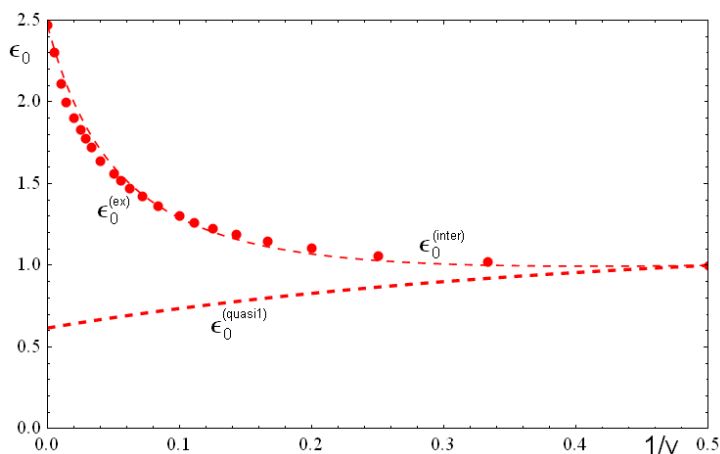


Рис.11. Сравнение первого квазиклассического приближения для основного уровня энергии в виде интерполяционной формулы (1.13) – тонкая штриховая линия – с точными значениями энергии – крупные точки – и с квазиклассикой полуцелого квантования (1.8) – толстые штрихи – в расширенном интервале показателей степени $2 < \nu < \infty$ (используется шкала обратных значений $1/\nu$).

Видно, что точность такой аппроксимации весьма велика и она равномерно распределяется по всем значениям показателя степени в указанном интервале.

Добавим еще один пример использования интерполяционной формулы для фазовой добавки в (1.12) для малых значений ν . В интервале $0 < \nu < 2$ хорошее приближение обеспечивает простое выражение $\gamma = \frac{1}{2}(\nu/2)^{1/6.55}$. (1.19)

Рис. 12 показывает это.

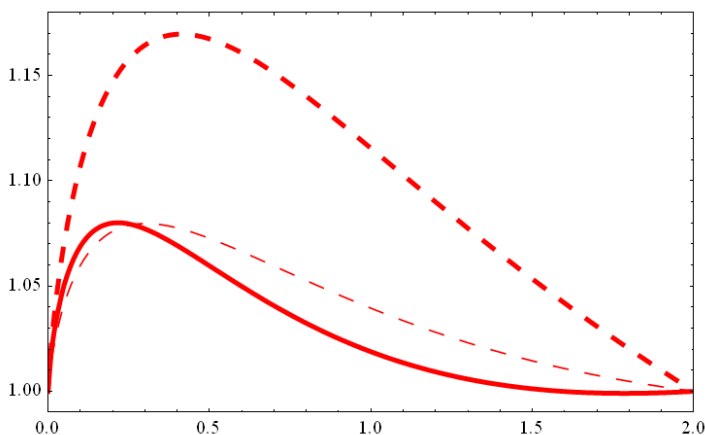


Рис.12. Сравнение первого квазиклассического приближения для основного уровня энергии с интерполяционной формулой (1.14) – тонкая штриховая линия – с точными значениями энергии – сплошная кривая – и с квазиклассикой при полуцелом квантовании (1.8) – толстые штрихи – в интервале показателей степени $0 < \nu < 2$.

Далее мы переходим к возбужденным состояниям. Энергия первого возбужденного состояния для четверного осцилятора в первом квазиклассическом приближении согласно (1.10) равна

$\varepsilon_1^{(1)} = 3.75192$, а точное значение $\varepsilon_1 = 3.79967$, так что относительная ошибка составляет $\delta_1^{(1)} = 1.3\%$. Для второго возбужденного состояния соответственно $\varepsilon_2^{(1)} = 7.41399$, $\varepsilon_2 = 7.45570$ и относительная ошибка равна $\delta_2^{(1)} = 0.56\%$. Для

третьего возбужденного состояния $\varepsilon_3^{(1)} = 11.6115$, $\varepsilon_3 = 11.6447$ и $\delta_3^{(1)} = 0.28\%$.

Таким образом, уже для первого возбужденного состояния четверного осциллятора точность первого квазиклассического приближения для энергии оказывается весьма значительной: ошибка уменьшается на порядок. Далее ошибка уменьшается с каждым возбуждением вдвое.

Для линейного потенциала соответствующие показатели таковы: энергия первого возбужденного состояния для линейного потенциала осциллятора в первом квазиклассическом приближении согласно (1.10) равна $\varepsilon_1^{(1)} = 2.32025$, а точное значение $\varepsilon_1 = 2.33811$, так что относительная ошибка составляет $\delta_1^{(1)} = 0.76\%$. Для второго возбужденного состояния соответственно $\varepsilon_2^{(1)} = 3.26162$, $\varepsilon_2 = 3.24820$ и относительная ошибка равна $\delta_2^{(1)} = -0.41\%$. Для третьего возбужденного состояния $\varepsilon_3^{(1)} = 4.08180$, $\varepsilon_3 = 4.08795$ и $\delta_3^{(1)} = 0.15\%$. Ситуация с абсолютными значениями относительных ошибок аналогична той, что наблюдается для четверного осциллятора.

Близость уровней энергии первого квазиклассического приближения к точным значениям для возбужденных стационарных состояний проиллюстрируем графически на интервале значений показателя степени $0 < \nu < 10$:

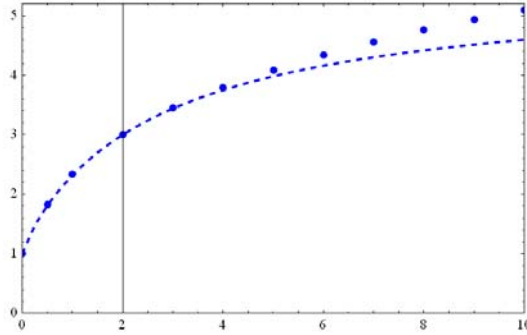


Рис. 13. Сравнение результатов первого квазиклассического приближения для уровней энергии первого возбужденного состояния степенных симметричных осцилляторов с точными значениями.

Второе квазиклассическое приближение для энергии получаем, решая уравнение

$$\oint p dx - \frac{\hbar^2}{24m} \frac{d^2}{dE^2} \oint U'' p dx = h(n + \frac{1}{2}) \quad (1.20)$$

В безразмерных величинах имеем

$$4 \int_0^{\frac{1}{\varepsilon^v}} \sqrt{\varepsilon - z^v} dz - \frac{1}{3} v(v-1) \frac{d^2}{d\varepsilon^2} \int_0^{\frac{1}{\varepsilon^v}} z^{v-2} \sqrt{\varepsilon - z^v} dz = 2\pi(n + \frac{1}{2}).$$

С помощью замены переменной $z = (\varepsilon y)^{1/v}$ интегралы выражаем через бета-функции:

$$\frac{4}{v} \varepsilon^{\frac{v+2}{2v}} B(\frac{3}{2}, \frac{1}{v}) - \frac{1}{3} (v-1) \frac{3v-2}{2v} \frac{v-2}{2v} e^{-\frac{v+2}{2v}} B(\frac{v-1}{v}, \frac{3}{2}) = 2\pi(n + \frac{1}{2}).$$

Получаем квадратное уравнение для $\varepsilon^{\frac{v+2}{2v}}$:

$$C_1(\varepsilon^{\frac{\nu+2}{2\nu}})^2 - C_2\varepsilon^{\frac{\nu+2}{2\nu}} - C_3 = 0, \text{ где } C_1 = \frac{4}{\nu}B(\frac{3}{2}, \frac{1}{\nu}),$$

$$C_2 = 2\pi(n + \frac{1}{2}) \text{ и } C_3 = \frac{1}{3}(\nu-1)\frac{3\nu-2}{2\nu}\frac{\nu-2}{2\nu}B(\frac{\nu-1}{\nu}, \frac{3}{2}),$$

$$\text{так что } \varepsilon^{\frac{\nu+2}{2\nu}} = \frac{C_2 + \sqrt{C_2^2 + 4C_1C_3}}{2C_1}.$$

Таким образом, уровни энергии второго квазиклассического приближения вычисляются по формуле

$$\varepsilon_n^{(2)} = \left[\frac{C_2 + \sqrt{C_2^2 + 4C_1C_3}}{2C_1} \right]^{\frac{2\nu}{\nu+2}}. \quad (1.21)$$

Сопоставление первого и второго квазиклассических приближений с точными значениями энергии иллюстрируется на графиках рис. 14.

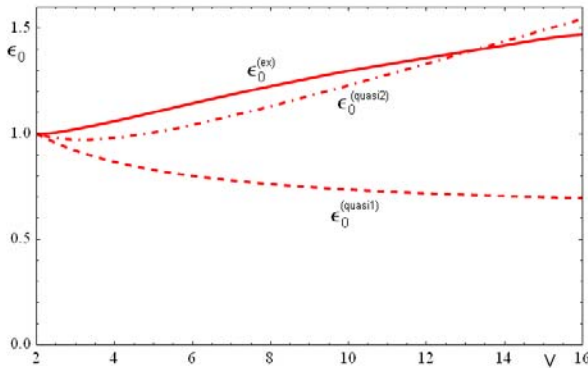


Рис. 14. Поведение двух квазиклассических приближений в сравнении с точными значениями энергии основного состояния (сплошная линия).

Видно, что в выбранном интервале значений показателя степени второе приближение дает лучшие результаты.

Добавим также результат расчета энергии основного состояния в третьем квазиклассическом приближении, опуская вычислительную сторону.

Объединение всех трех приближений с точными кривыми воспроизведено на следующем рисунке.

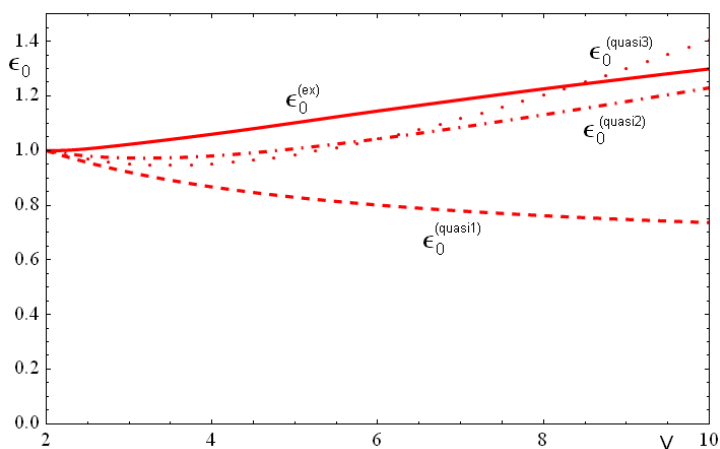


Рис. 15. Поведение трех квазиклассических приближений в сравнении с точными значениями энергии основного состояния (сплошная кривая).

Третье приближение (пунктир) в интервале ν от 2 до 6 оказывается хуже второго.

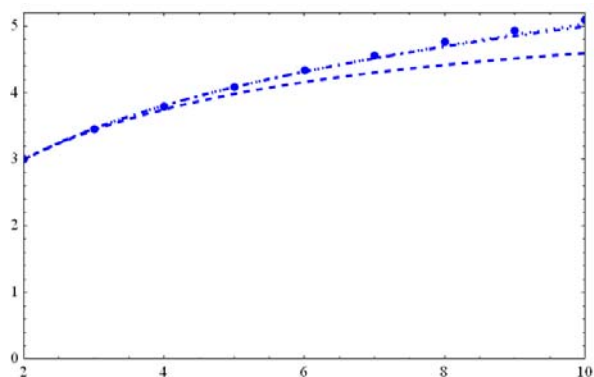


Рис. 16. Поведение трех квазиклассических приближений в сравнении с точными значениями энергии первого возбужденного состояния (крупные точки).

Суммируем результаты трех квазиклассических приближений для энергии основного и первых пяти возбужденных состояний четверного осциллятора в виде таблицы значений относительных ошибок *в процентах*:

	1-е приближ.	2-е приближ.	3-е приближ.
e_0	+18	+7.5	+10
e_1	+1.3	- 0.28	- 0.23
e_2	+0.56	- 0.0013	+0.0056
e_3	+0.29	- 0.0021	- 0.00028
e_4	+0.17	- 0.00068	- 0.000016
e_5	+0.12	- 0.00031	$-7.2 \cdot 10^{-6}$

Приведем также аналогичную таблицу для абсолютных ошибок (относительные ошибки иногда слишком быстро убывают с увеличением возбуждения за счет роста самой энергии):

	1-е приближ.	2-е приближ.	3-е приближ.
e_0	+0.19	+0.080	+0.11
e_1	+0.048	- 0.011	- 0.0087
e_2	+0.042	- 0.000098	+0.00042
e_3	+0.033	- 0.00024	- 0.000033
e_4	+0.028	- 0.00011	$-2.5 \cdot 10^{-6}$
e_5	+0.025	- 0.000065	$-1.5 \cdot 10^{-6}$

Некоторые выводы. Точность правил квантования квазиклассического приближения велика даже для слабовозбужденных уровней энергии, включая основной. ВКБ-метод давно вошел во все монографии и учебники, посвященные квантовой механике. Однако по традиции результаты для правил квантования энергии рассматриваются слишком осторожно. Речь идет о рамках применимости правил квантования Бора-Зоммерфельда, особенно о возможности использования приближенного квантования при малых энергиях (малых квантовых числах n , нумерующих стационарные состояния и одновременно уровни энергии невырожденных

состояний одномерного движения). Почти во всех книгах оговаривается слишком жесткое условие $n \gg 1$.

Одного из авторов данной монографии давно заинтересовал вопрос о точности правил квантования, однако велико было влияние авторитета книг по квантовой теории, хотя ни в одной из них не приводились какие-либо примеры или иллюстрации действительно плохой точности правил квантования для малых возбуждений. Постепенно зародилась сама постановка вопроса, были сделаны оценки на основе сравнения с некоторыми точно решаемыми моделями. Идея представляется интересной, даже любопытной, а в сочетании с ситуацией в случаях, когда имеется критический диапазон энергий, даже несколько парадоксальной. Видимо, пришло время сделать выводы по этой проблеме и уточнить взгляд на этот вопрос. Это кажется весьма целесообразным и актуальным, так как ВКБ-метод является единственным универсальным аналитическим методом решения одномерной задачи об определении энергетического спектра в общей форме для произвольных полей.

В последние годы, правда, появились уже работы, в которых такой вопрос затрагивается, однако они все еще остаются редким исключением из общей массы исследований, в которых по-прежнему трактуется вопрос о пределах применимости ВКБ-правил квантования традиционно. Сущность получаемых результатов сводится к утверждению о

том, что даже для полей с особенностями правила квантования энергии дают весьма хорошую точность даже для основного уровня энергии, а при переходе всего лишь к первому возбужденному уровню относительная ошибка уменьшается примерно на порядок. Дополнительные, связанные с рассмотренным вопросом проблемы: влияние особенностей потенциала, ситуация в критическом диапазоне энергии, учет поправок к первому квазиклассическому приближению, методы получения правил квантования в более высоком приближении, точность расчета плотности уровней энергии и расстояния между уровнями в области малых энергий.

Рекомендации к внедрению сводятся к тому, что оговорки, которыми обычно сопровождается обсуждение пределов применимости квазиклассических правил квантования для энергии, сводящиеся к требованию $n \gg 1$, оказываются излишне осторожными. Фактически эти правила дают хорошую точность вплоть до основного уровня энергии. Ситуация такова, что хотя при получении волновых функций стационарных состояний в координатном представлении при реализации метода ВКБ необходима большая осторожность и действительно требуется выполнение условия $n \gg 1$ (наряду с «выключением» окрестностей классических точек поворота и т. п.), правила квантования, будучи интегральной характеристикой движения, имеют более широкую область применимости, как это и бывает

часто в расчетах, когда получаемый результат имеет более широкие «полномочия», нежели те предпосылки, которые лежат в основе его вывода. Кроме этого, имеется способ нахождения этих правил, не связанный с конкретной формой волновых функций координатного представления.

О поправках к правилам квантования. Правила квантования Бора-Зоммерфельда относятся к первому приближению ВКБ-метода. Известны и поправки второго и третьего приближения, однако ни в одной книге по квантовой механике они не фигурируют. С другой стороны, они существенно уточняют результаты первого приближения и могут служить для оценки точности первого приближения. Это можно объяснить, видимо, тем, что обычно при выводе правил квантования используется такой способ, который неудобен для учета поправок более высокого порядка. Сюда же можно отнести и вопрос о виде фазовой поправки в правой части стандартной записи правил квантования, чувствительной к более тонким деталям профиля поля — особенностям потенциала. В специальных случаях правила квантования могут отличаться от «полуцелого» правила. Вопрос о конкретных значениях этой добавки и, особенно, о ее зависимости от энергии представляет особый интерес.

Резюме: независимо от возможностей вывода уточненных правил квантования их нужно приводить при обсуждении ВКБ-

приближения во всех учебниках и монографиях по квантовой механике. Это позволит расширить представления о возможностях квазиклассического приближения, о его точности, дать пищу новым задачам по квазиклассике в более высоком приближении и т. д. То же (хотя и, возможно, в меньшей степени) касается фазовой добавки. Вопрос о поправках, конечно, тесно связан с проблемой точности квазиклассических правил квантования. Здесь мы подходим к проблеме непосредственного получения ВКБ-правил квантования в рамках так называемого «нефункционального» подхода [3]. Вопрос же о добавке фазовой можно, вообще говоря, отделить от вопроса о квазиклассических поправках, т. е. поправки в правилах квантования содержатся двоякой природы: чисто квазиклассические и фазовые.

Наконец, о литературе. Вопросам, связанным с квазиклассикой много внимания уделено в монографии [3] и сборнике задач [4]. Там же можно найти многочисленные ссылки на работы как первого периода создания квазиклассического метода в квантовой механике, так и последующих этапов развития квазиклассики и приложения ее к различным разделам квантовой теории.

1.4. Вариационные методы

Известный адвокат по уголовным делам Перри Мейсон вошел в свой кабинет, снял шляпу и отработанным движением швырнул ее на бюст Блэкстоуна, стоявший на книжной полке.

Э.С.Гарднер

Вариационный метод [1, 2, 4] расчета основного уровня энергии основан на том, что среднее значение гамильтониана всегда больше (или равно), чем наименьшее значение энергии в спектре: $\varepsilon_0 \leq \bar{H}$. Задача состоит в том, чтобы подобрать подходящую по симметрии, общему профилю, числу узлов и т. д. волновую функцию (варьируемую, «пробную»), найти значения параметров, входящих в нее и минимизирующих среднюю энергию, а также саму минимальную среднюю энергию e_{\min} , которая и будет служить аппроксимацией искомого основного уровня энергии e_0 .

Таким образом, перед нами стоит выбор подходящей пробной функции. Начнем с простой функции гауссовского распределения («гауссиана»)

$$y(z) = \left(\frac{a}{\pi} \right)^{1/4} \exp(-az^2 / 2). \quad (1.22)$$

В этом случае имеется один варьируемый параметр a , через который выражаются все интересующие нас физические величины. Для рассматриваемых степенных симметричных потенциалов гамильтониан в координатном представлении имеет вид $\hat{h} = \hat{p}_z^2 + |z|^v$. Вычисляем средние значения квадратов

координаты и импульса, которые в нашем случае (стационарное состояние и симметричные осцилляторы) являются одновременно дисперсиями этих величин:

$$\langle z^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} z^2 y(z)^2 dz = \frac{1}{2a} \quad \text{и} \quad \langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial y(z)}{\partial z} \right)^2 dz = \frac{a}{2},$$

так что неопределенности равны $\Delta z = \sqrt{\frac{1}{2a}}$ и $\Delta p = \sqrt{\frac{a}{2}}$,

а произведение неопределенностей импульса и координаты (ПН) оказывается равным неизменной минимально возможной величине $\Delta p \Delta z = \frac{1}{2}$. Это один из недостатков используемого

вариационного подхода с гауссианом – изменение ПН в зависимости от значений показателя степени ν не улавливается, хотя такой метод компенсируется иными достоинствами при нахождении других величин. Среднее значение потенциальной энергии выражается через гамма-

функцию Эйлера:

$$\langle |z|^\nu \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |z|^\nu y(z)^2 dz = \frac{\Gamma(\frac{1+\nu}{2})}{\sqrt{\pi} a^{\nu/2}},$$

так что среднее значение полной энергии равно

$$\langle e \rangle = \langle p^2 \rangle + \langle |z|^\nu \rangle = \frac{a}{2} + \frac{\Gamma(\frac{1+\nu}{2})}{\sqrt{\pi} a^{\nu/2}}.$$

Минимум этого выражения достигается при значении

варьируемого параметра

$$a_{\min} = \left[\frac{\nu}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{1+\nu}{2}\right) \right]^{\frac{2}{2+\nu}},$$

в силу чего оценка энергии основного состояния выглядит следующим образом:

$$\langle e \rangle_{\min} = \frac{a_{\min}}{2} + \frac{\Gamma(\frac{1+v}{2})}{\sqrt{\pi} a_{\min}^{v/2}} = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{v} \right) a_{\min}.$$

Обратим внимание, что в этом выражении вклады кинетической и потенциальной энергии соответствуют теореме вириала [2].

Наконец, вычисляем амплитуду классических колебаний

$$z^{cl} = e^{1/v} = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{v} \right)^{1/v} a_{\min}^{1/v} \quad \text{и вероятность пребывания в}$$

неклассической области движения

$$w = 2 \int_{z^{cl}}^{\infty} \rho(z) dz = \operatorname{Erfc} \left(\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{v} \right)^{1/v} a_{\min}^{\frac{2+v}{2v}} \right),$$

выражаемую через интеграл вероятностей.

Итак, найденные с помощью пробной функции в виде гауссиана (1.17) интересующие нас некоторые приближенные характеристики основного состояния симметричных степенных осцилляторов описываются следующими формулами:

$$\text{вариационный параметр} \quad a_0 = \left[\frac{v}{\sqrt{\pi}} \Gamma \left(\frac{1+v}{2} \right) \right]^{\frac{2}{2+v}}, \quad (1.23)$$

волновая функция основного состояния в координатном представлении

$$y_0(z) = \left(\frac{a_0}{\pi} \right)^{1/4} \exp(-a_0 z^2 / 2), \quad (1.24)$$

плотность вероятности координат

$$\rho_0(z) = \left(\frac{a_0}{\pi} \right)^{1/2} \exp(-a_0 z^2), \quad (1.25)$$

энергия нулевых колебаний $e_0^{(gauss)} = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu} \right) a_0,$ (1.26)

дисперсия координаты $Dz_0^{(gauss)} = \frac{1}{2a_0},$ (1.27)

неопределенность координаты $\Delta z_0^{(gauss)} = \sqrt{\frac{1}{2a_0}},$ (1.28)

волновая функция основного состояния в импульсном представлении

$$y_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ipz) y(z) dz = \left(\frac{1}{\pi a_0} \right)^{1/4} \exp(-p^2 / a_0 / 2), \quad (1.29)$$

плотность вероятности импульсов

$$\rho_0(p) = \left(\frac{1}{\pi a_0} \right)^{1/2} \exp(-p^2 / a_0), \quad (1.30)$$

дисперсия импульса $Dp_0^{(gauss)} = \frac{a_0}{2},$ (1.31)

неопределенность импульса $\Delta p_0^{(gauss)} = \sqrt{\frac{a_0}{2}},$ (1.32)

произведение неопределенностей импульса и координаты (ПН)

$$\Delta p_0 \Delta z_0^{(gauss)} = \frac{1}{2}, \quad (1.33)$$

амплитуда классических колебаний

$$z_0^{cl(gauss)} = \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu} \right) a_0 \right]^{\frac{1}{\nu}}, \quad (1.34)$$

вероятность для неклассической области движения

$$w_0^{(gauss)} = \text{Erfc} \left(\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu} \right)^{1/\nu} a_0^{\frac{2+\nu}{2\nu}} \right). \quad (1.35)$$

Сразу отметим предварительные особенности такого подхода. Во-первых, результаты оказываются точными для квадратичного потенциала, поскольку пробная функция является волновой функцией основного состояния этого осциллятора. Во-вторых, следует ожидать достаточно хорошей точности для окрестности $\nu = 2$. Фактически же точность расчетов указанных физических величин даже при таком простом способе вариационной оценки оказывается весьма высокой в достаточно широком интервале значений показателей степени потенциалов. В частности, интересно, что детально описывается немонотонный характер поведения энергии в диапазоне $0 < \nu < 2$, а также хорошие аппроксимации получаются при малых значениях $\nu \ll 1$. Качественно отмеченные особенности отражены на графиках рис. 18, где

дается сравнение с результатами других вариационных оценок и численными расчетами.

Отметим частные случаи. Для линейного потенциала с $\nu = 1$

$$a_0 = \frac{1}{\pi^{1/3}}, \quad e_0^{(gauss)} = \frac{3}{2\pi^{1/3}} = 1,02418, \quad \text{что близко к точному}$$

значению $e_0 = 1.01879$, относительная ошибка равна

$\delta_0 = -0.53\%$. Для квадратичного потенциала с $\nu = 2$ $a_0 = 1$,

$e_0^{(gauss)} = 1$, что соответствует точному значению, поскольку

используемая пробная функция является как раз собственной функцией этой системы для основного состояния. Для

четверного осциллятора с $\nu = 4$ $a_0 = 3^{1/3}$, $e_0^{(gauss)} = \frac{3^{4/3}}{4} = 1,08169$,

что близко к точному значению $e_0 = 1.06036$, а относительная

ошибка равна $\delta_0 = -2\%$. Для осциллятора с $\nu = 10$

$a_0 = \frac{3^{1/2} 5^{1/3} 7^{1/6}}{2^{2/3}}$, $e_0^{(gauss)} = \frac{3^{4/3} 7^{1/6}}{10^{2/3}} = 1,548$, что уже достаточно

существенно отличается от точного значения $e_0 = 1.299$ с

относительной ошибкой $\delta_0 = -19\%$.

С ростом показателя степени точность постепенно снижается, так как профиль потенциала приближается к прямоугольному, где гауссиан не в силах передать реальное поведение волновой функции, запертой в ограниченном интервале (при $\nu \rightarrow \infty$ $a_0 \rightarrow \infty$ и $e_0^{(gauss)} \rightarrow \infty$).

Такая грубая вариационная оценка не только обеспечивает достаточно высокую точность для основного уровня энергии в рассмотренном интервале показателя степени, но и передает тонкости немонотонного поведения – минимум вблизи 2 и максимум около 0.2, а именно: для минимума $e_0^{(gauss)}_{\min} = 0.999205$ при $v_{\min} = 1.82962$, тогда как точные значения этих величин равны $e_{0\min} = 0.998994$ при $v_{\min} = 1.78675$, для максимума $e_0^{(gauss)}_{\max} = 1.08572$ при $v_{\max} = 0.298709$, тогда как точные значения равны $e_{0\max} = 1.08009$ при $v_{\max} = 0.216393$. Как видим, достаточно высокую точность обеспечивает гауссово приближение даже для столь тонких деталей поведения основного уровня энергии, как величина и положение его экстремальных значений.

Предельные значения при $v \rightarrow 0$: $a_0 \rightarrow 0$ и $e_0^{(gauss)} \rightarrow 1$. Для малых $v \ll 1$
$$e_0^{(gauss)} = 1 + \frac{v}{2} [1 + \psi(1/2) - \ln v] + O(v^2 \ln v), \quad (1.36)$$
 где так называемая дигамма-функция ψ есть логарифмическая производная от гамма-функции: $\psi \equiv \Gamma' / \Gamma$. В численном виде $e_0^{(gauss)} = 1 + v(-0.481755 - 0.5 \ln v)$, что оказывается весьма близким к расчетному поведению.

Предельное значение при $\nu \rightarrow 0$ вероятности для неклассической области оказывается конечным и равно

$$w_0^{(gauss)} = \text{Erfc}[\sqrt{\exp(1 + \psi(1/2))}] , \quad (1.37)$$

в численном виде $w_0^{(gauss)} = 0.382359 , \quad (1.38)$

что также близко к уточненному значению $w_0 = 0.387363$.

Далее переходим к первому возбужденному состоянию, для которого в качестве пробной функции должна быть выбрана нечетная функция. Основываемся также на гауссиане:

$$y(z) = \left(\frac{4a^3}{\pi} \right)^{1/4} z \exp(-az^2/2) . \quad (1.39)$$

По-прежнему имеется один варьируемый параметр a , через который выражаются все интересующие нас физические величины. Несложные расчеты, аналогичные проведенным для основного состояния, опускаем, приведя окончательные результаты:

вариационный параметр $a_1 = \left[\frac{2\nu}{3\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{3+\nu}{2}\right) \right]^{\frac{2}{2+\nu}} , \quad (1.40)$

волновая функция первого возбужденного состояния в координатном представлении

$$y_1(z) = \left(\frac{4a_1^3}{\pi} \right)^{1/4} z \exp(-a_1 z^2/2) , \quad (1.41)$$

плотность вероятности координат

$$\rho_1(z) = 2 \left(\frac{a_1^3}{\pi} \right)^{1/2} z^2 \exp(-a_1 z^2), \quad (1.42)$$

энергия нулевых колебаний $e_1^{(gauss)} = 3 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu} \right) a_1,$ (1.43)

дисперсия координаты $Dz_1^{(gauss)} = \frac{3}{2a_1},$ (1.44)

неопределенность координаты $\Delta z_1^{(gauss)} = \sqrt{\frac{3}{2a_1}},$ (1.45)

волновая функция первого возбужденного состояния в импульсном представлении

$$y_1(p) = \left(\frac{4}{\pi a_1^3} \right)^{1/4} p \exp(-p^2 / a_1 / 2), \quad (1.46)$$

плотность вероятности импульсов

$$\rho_1(p) = 2 \left(\frac{1}{\pi a_1^3} \right)^{1/2} p^2 \exp(-p^2 / a_1), \quad (1.47)$$

дисперсия импульса $Dp_1^{(gauss)} = \frac{3a_1}{2},$ (1.48)

неопределенность импульса $\Delta p_1^{(gauss)} = \sqrt{\frac{3a_1}{2}},$ (1.49)

произведение неопределенностей импульса и координаты (ПН)

$$\Delta p_1 \Delta z_1^{(gauss)} = \frac{3}{2}, \quad (1.50)$$

амплитуда классических колебаний

$$z_1^{cl(gauss)} = \left[3 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu} \right) a_1 \right]^{\frac{1}{\nu}}, \quad (1.51)$$

вероятность для неклассической области движения

$$w_1^{(gauss)} = \text{Erfc} \left(\sqrt{a_1} z_1^{cl} \right) + \frac{2\sqrt{a_1}}{\sqrt{\pi}} z_1^{cl} \exp(-a_1 z_1^{cl2}) . \quad (1.52)$$

В случае конкретных осцилляторных систем получаем: для

линейного потенциала с $\nu = 1$ $a_1 = \frac{(2/3)^{2/3}}{\pi^{1/3}}$,

$e_1^{(gauss)} = 3 \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/3} = 2.34478$, что близко к точному значению

$e_1 = 2.33811$, относительная ошибка равна $\delta_1 = -0.29\%$; для

квадратичного потенциала с $\nu = 2$ $a_1 = 1$, $e_1^{(gauss)} = 3$, что

соответствует точному значению, поскольку используемая пробная функция является как раз собственной функцией этой системы для первого возбужденного состояния; для четвертого

осциллятора с $\nu = 4$ $a_1 = 5^{1/3}$, $e_1^{(gauss)} = \frac{9}{4} 5^{1/3} = 3.84745$, что близко

к точному значению $e_1 = 3.799673$, а относительная ошибка

равна $\delta_1 = -1.3\%$; для осциллятора с $\nu = 10$ $a_1 = \frac{15^{1/3} 77^{1/6}}{2^{2/3}}$,

$e_1^{(gauss)} = \frac{9 \cdot 3^{1/3} 77^{1/6}}{10^{2/3}} = 5.76808$, что уже достаточно существенно

отличается от точного значения $e_1 = 5.0979$ с относительной ошибкой $\delta_1 = -13\%$.

Возникает желание продолжить изучение состояний более высокого возбуждения. Однако на этом пути стоит следующее осложнение: варьируемая функция для второго возбужденного состояния должна быть ортогональна как основной функции, так и функции первого возбужденного состояния. Последнее условие удовлетворяется четностью пробной функции, однако для ортогональности к функции основного состояния нужно знать точно эту функцию, а такого знания нет: есть лишь приближение. Если удовлетвориться такой приближенной ортогональностью, то это уже не будет обязательно оценкой сверху. Впрочем, вот какие результаты дает подобный подход (детали расчетов опускаем).

Пробная функция гауссова типа с указанным свойством ортогональности имеет вид

$$y(z) = C \left(z^2 - \frac{1}{a + a_0} \right) \exp(-az^2 / 2), \quad (1.53)$$

где a_0 является вариационным параметром для основного состояния

$$a_0 = \left[\frac{\nu}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{1+\nu}{2}\right) \right]^{\frac{2}{2+\nu}}, \quad (1.54)$$

а нормировочный коэффициент

$$C = 2 \sqrt{\frac{a^{5/2}}{\sqrt{\pi}(3a^2 + 2aa_0 + 3a_0^2)}}(a + a_0). \quad (1.55)$$

Расчетные результаты для опорных значений показателя степени оказываются такими: для линейного потенциала с $\nu = 1$ $e_2^{(gauss)} = 3.2600$, что близко к точному значению $e_2 = 3.2482$, относительная ошибка равна $\delta_2 = -0.36\%$; для квадратичного потенциала с $\nu = 2$ $e_2^{(gauss)} = 5$, что соответствует точному значению, поскольку используемая пробная функция является как раз собственной функцией этой системы для второго возбужденного состояния; для четверного осциллятора с $\nu = 4$ $e_2^{(gauss)} = 7.5373$, что близко к точному значению $e_2 = 7.4557$, а относительная ошибка равна $\delta_2 = -1.1\%$; для осциллятора с $\nu = 10$ $e_2^{(gauss)} = 12.240$, что уже достаточно существенно отличается от точного значения $e_2 = 11.154$ с относительной ошибкой $\delta_2 = -9.7\%$.

Сопоставление гауссовых вариационных оценок энергии с точными значениями, а также с другими вариационными подходами представлено на рис. 18-20. Пробные волновые функции для значений показателя степени 1 и 4 в сравнении с точными изображены на рис. 21-24.

Несмотря на удовлетворительный характер результатов гауссового однопараметрического варьирования, возникает желание продолжить более детальное изучение степенных потенциалов на основе двухпараметрических пробных функций. Одним из вариантов будет служить следующая модификация пробной функции гауссового распределения для основного состояния

$$y(z) = \sqrt{\frac{ka^{1/k}}{2\Gamma(1/k)}} \exp(-a|z|^k/2). \quad (1.56)$$

В этом случае дисперсия координаты

$$Dz^{(ak)} = \frac{\Gamma(3/k)}{\Gamma(1/k)a^{2/k}}, \quad (1.57)$$

дисперсия импульса $Dp^{(ak)} = \frac{k^2}{4} \frac{\Gamma(2-1/k)}{\Gamma(1/k)} a^{2/k}, \quad (1.58)$

среднее значение потенциальной энергии

$$\langle |z|^v \rangle = \frac{\Gamma(\frac{1+v}{k})}{\Gamma(1/k)a^{v/k}}. \quad (1.59)$$

Усреднение гамильтониана приводит к формуле

$$\langle e \rangle = \frac{k^2}{4} \frac{\Gamma(2-1/k)}{\Gamma(1/k)} a^{2/k} + \frac{\Gamma(\frac{1+v}{k})}{\Gamma(1/k)a^{v/k}}. \quad (1.60)$$

Минимизацию этого выражения проведем в два этапа. Сначала аналитически минимизируем по параметру a , что дает

$$a_{\min} = \left(\frac{2\nu\Gamma\left(\frac{1+\nu}{k}\right)}{k^2\Gamma(2-1/k)} \right)^{k/(\nu+k)} \quad (1.61)$$

$$\text{и} \quad e_{\min} = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu} \right) \left(\frac{2\nu\Gamma\left(\frac{1+\nu}{k}\right)}{k^2\Gamma(2-1/k)} \right)^{k/(\nu+k)}. \quad (1.62)$$

Далее проводится численная минимизация с одновременными вычислениями физических характеристик. Опуская расчетные детали, отметим, что эффективность такой аппроксимации отражена на рис. 18-20. Приведем также конкретные результаты оценок энергии нулевых колебаний для характерных опорных точек: для линейного потенциала с $\nu=1$ $e_0^{(ak)}=1.01907$, что близко к точному значению $e_0=1.01879$, относительная ошибка равна $\delta_0=-0.03\%$; для квадратичного потенциала с $\nu=2$ $e_0^{(ak)}=1$, что соответствует точному значению, поскольку используемая пробная функция с параметрами $a=1; k=2$ является как раз собственной функцией этой системы для основного состояния; для четверного осциллятора с $\nu=4$ $e_0^{(ak)}=1.0625$, что близко к точному значению $e_0=1.060362$, а относительная ошибка равна $\delta_0=-0.2\%$; для осциллятора с $\nu=10$ $e_0^{(ak)}=1.33214$, что

отличается от точного значения $e_0 = 1.2988$ с относительной ошибкой $\delta_0 = -3\%$; для осциллятора с $\nu = 20$ $e_0^{(ak)} = 1.68509$, что уже отличается от точного значения $e_0 = 1.5605$ с относительной ошибкой $\delta_0 = -8\%$.

Как и в случае гауссовом, для первого возбужденного состояния строим пробную функцию с координатным множителем, обеспечивающим ортогональность к четной функции основного состояния:

$$y(z) = \sqrt{\frac{ka^{3/k}}{2\Gamma(3/k)}} z \exp(-a|z|^k/2). \quad (1.63)$$

Далее все происходит так, как в случае основного состояния. Не приводя предварительных аналитических расчетов первого этапа варьирования с параметром a , переходим к численным результатам второго этапа варьирования (по параметру k).

Для линейного потенциала с $\nu = 1$, $e_1^{(ak)} = 2.33825$, что близко к точному значению $e_1 = 2.33811$, относительная ошибка равна $\delta_1 = -0.006\%$. Для квадратичного потенциала с $\nu = 2$, $e_1^{(ak)} = 3$, что соответствует точному значению, поскольку используемая пробная функция является как раз собственной функцией этой системы для первого возбужденного состояния.

Для четверного осциллятора с $\nu = 4$, $e_1^{(ak)} = 3.8024$, что близко к точному значению $e_1 = 3.799673$, а относительная ошибка равна $\delta_1 = -0.07\%$. Для осциллятора с $\nu = 10$, $e_1^{(ak)} = 5.1607$, что также близко к точному значению $e_1 = 5.0979$ с относительной ошибкой $\delta_1 = -1.2\%$. Наконец, для осциллятора с $\nu = 20$, $e_1^{(ak)} = 6.5019$, что уже несколько отличается от точного значения $e_1 = 6.21936$ при относительной ошибке $\delta_1 = -4.5\%$.

Затем следовало бы поговорить, конечно, об аналогичном подходе для второго возбужденного состояния, но оставим этот материал для самостоятельной отработки любознательному читателю.

Тем временем, мы займемся особым вариантом двухпараметрического варьирования на основе еще одной модификации все того же гауссовского распределения с пробной функцией

$$y(z) = \exp(-az^2 / 2 - b|z|^{(1+\nu/2)} / 2), \quad (1.64)$$

содержащей не только два параметра (a и b), но и дополнительную гибкую возможность подстраиваться под соответствующее значение показателя степени ν исследуемого осциллятора.

В данном случае сразу же идет варьирование численное (автоматически включающее нормировку пробной функции), так что приведем только результаты для опорных точек.

Для линейного потенциала с $\nu=1$ $e_0^{(abv)}=1.01948$, что близко к точному значению $e_0=1.01879$, относительная ошибка равна $\delta_0=-0.07\%$; для квадратичного потенциала с $\nu=2$ $e_0^{(ak)}=1$, что соответствует точному значению, поскольку используемая пробная функция с параметрами $a+b=1$ является как раз собственной функцией этой системы для основного состояния; для четверного осциллятора с $\nu=4$ $e_0^{(abv)}=1.06084$, что близко к точному значению $e_0=1.060362$, а относительная ошибка равна $\delta_0=-0.05\%$; для осциллятора с $\nu=10$ $e_0^{(abv)}=1.29915$, что отличается от точного значения $e_0=1.2988$ с относительной ошибкой $\delta_0=-0.03\%$; для осциллятора с $\nu=20$ $e_0^{(abv)}=1.57686$, что уже отличается от точного значения $e_0=1.5605$ с относительной ошибкой $\delta_0=-1\%$.

На графиках рис. 18 видно, что такой способ вариационной оценки имеет преимущество почти для всех осцилляторов, кроме случаев малых ν .

Расчеты для первого возбужденного состояния проведены с двухпараметрической пробной функцией

$$y(z) = z \exp(-az^2 / 2 - b|z|^{(1+\nu/2)} / 2). \quad (1.65)$$

А результаты таковы. Для линейного потенциала с $\nu=1$, $e_1^{(abv)} = 2.33846$, что близко к точному значению $e_1 = 2.33811$, относительная ошибка равна $\delta_1 = -0.015\%$. Для квадратичного потенциала с $\nu=2$, $e_1^{(abv)} = 3$, что соответствует точному значению, поскольку используемая пробная функция является собственной функцией этой системы для первого возбужденного состояния. Для четверного осциллятора с $\nu=4$, $e_1^{(abv)} = 3.80035$, что близко к точному значению $e_1 = 3.799673$, а относительная ошибка равна $\delta_1 = -0.018\%$. Для осциллятора с $\nu=10$, $e_1^{(abv)} = 5.09820$, что также близко к точному значению $e_1 = 5.0979$ с относительной ошибкой $\delta_1 = -0.006\%$. Наконец, для осциллятора с $\nu=20$, $e_1^{(abv)} = 6.25296$, что также мало отличается от точного значения $e_1 = 6.21936$ при относительной ошибке $\delta_1 = -0.5\%$.

Таким образом, все рассмотренные способы вариационных оценок дают хорошие и даже очень хорошие результаты для основного и первого возбужденного состояний степенных симметричных осцилляторов в достаточно широкой области значений показателя степени ($0 < \nu < 20$). Именно в этом интервале и лежит главная опорная точка всех разновидностей

гауссовских пробных функций, когда приближения совпадают с точными результатами – благодатный полюс $\nu = 2$. Это, с одной стороны, сдерживает распространение результатов на большие значения ν , однако, с другой стороны, имеется иной полюс – $\nu = \infty$. Здесь также есть возможность использовать вариационный метод, основываясь на фундаменте решений для бесконечно глубокой прямоугольной ямы. А именно: в качестве пробной функции берем выражение

$$y(z) = \sqrt{\frac{2}{c}} \cos(\pi z / c) , \quad -c/2 < z < c/2, \quad (1.66)$$

соответствующее волновой функции основного состояния при движении на интервале c , который и будет служить вариационным параметром. При этом дисперсия импульса

$$Dp = \frac{\pi^2}{c^2}, \quad (1.67)$$

дисперсия координаты
$$Dz = \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2} \right) c^2, \quad (1.68)$$

среднее значение потенциальной энергии

$$\langle |z|^\nu \rangle = bc^\nu, \quad (1.69)$$

$$b = \frac{1}{(\nu+1)2^\nu} \left[1 + \frac{\Phi(\nu+1, \nu+2, i\pi) + \Phi(\nu+1, \nu+2, -i\pi)}{2} \right], \quad (1.70)$$

где $\Phi(\alpha, \beta, x)$ – вырожденная гипергеометрическая функция.

Среднее значение полной энергии

$$\langle e \rangle = \frac{\pi^2}{c^2} + bc^\nu. \quad (1.71)$$

Минимизирующий энергию параметр имеет вид

$$c_{\min} = \left(\frac{2\pi^2}{\nu b} \right)^{1/(2+\nu)}, \quad (1.72)$$

а сам минимум соответствует искомой вариационной оценке для основного уровня энергии

$$e_0^{(c-\cos)} = \langle e \rangle_{\min} = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{2\pi^2}{c_{\min}^2}. \quad (1.73)$$

Не приводя других формульных выражений, обратимся сразу к итогам расчетов для энергии основного состояния. В случае линейного потенциала с $\nu=1$ $e_0^{(\cos)} = 1.1377$, что не очень близко к точному значению $e_0 = 1.01879$, относительная ошибка равна $\delta_0 = -12\%$; для квадратичного потенциала с $\nu=2$ $e_0^{(\cos)} = 1.1357$, что также не очень близко к точному значению $e_0 = 1$, относительная ошибка $\delta_0 = -14\%$; для четверного осциллятора с $\nu=4$ $e_0^{(\cos)} = 1.1909$, что также не очень близко к точному значению $e_0 = 1.060362$, а относительная ошибка равна $\delta_0 = -12\%$; для осциллятора с $\nu=10$ $e_0^{(\cos)} = 1.399$, что отличается от точного значения $e_0 = 1.2988$ с относительной ошибкой $\delta_0 = -8\%$; для осциллятора с $\nu=20$ $e_0^{(\cos)} = 1.63153$,

что отличается от точного значения $e_0 = 1.5605$ с относительной ошибкой $\delta_0 = -5\%$; для осциллятора с $\nu = 50$ $e_0^{(\cos)} = 1.94154$, что уже отличается от точного значения $e_0 = 1.9033$ с относительной ошибкой $\delta_0 = -2\%$; для осциллятора с $\nu = 100$ $e_0^{(\cos)} = 2.12715$, что отличается от точного значения $e_0 = 2.10669$ с относительной ошибкой $\delta_0 = -1\%$; для осциллятора с $\nu = 200$ $e_0^{(\cos)} = 2.25864$, что уже мало отличается от точного значения $e_0 = 2.2467$ с относительной ошибкой $\delta_0 = -0.5\%$.

Таким образом, последний способ варьирования дает для всех осцилляторных систем даже при одном параметре хорошие и очень хорошие результаты для основного состояния.

Добавим, что для первого возбужденного состояния с пробной функцией

$$y(z) = \sqrt{\frac{2}{c}} \sin(2\pi z / c), \quad -c/2 < z < c/2 \quad (1.74)$$

получаются аналогичные результаты, которые для краткости приводить не будем. Эффективность такой аппроксимации демонстрируют графики на рис.19.

В завершение обратимся к другому предельному случаю $\nu \rightarrow 0$. Явные формулы для вариационных оценок основного уровня энергии позволяют рассмотреть поведение этих величин при малых показателях степени осцилляторов. Так, в случае

пробной функции на основе прямоугольной ямы (1.61) получаем для (1.68) в численном виде выражение

$$e_0^{(c-\cos)} = 1 + \nu(-0.291334 - \ln \sqrt{\nu}) = 1 + \nu \ln \frac{0.747266}{\sqrt{\nu}}, \quad (1.75)$$

гауссово варьирование с (1.17) в (1.31) дает результат получше

$$e_0^{(gauss)} = 1 + \nu(-0.481755 - \ln \sqrt{\nu}) = 1 + \nu \ln \frac{0.617698}{\sqrt{\nu}}, \quad (1.76)$$

а аппроксимация (1.57) с функцией (1.51) при $k = 3/2$

$$e_0^{(ak)} = 1 + \nu(-0.528102 - \ln \sqrt{\nu}) = 1 + \nu \ln \frac{0.589723}{\sqrt{\nu}} \quad (1.77)$$

оказывается лучшим приближением.

Точнее всего поведение основного уровня энергии в интервале $0 < \nu < 0.1$ передает интерполяционная формула

$$e_0^{(int)} = 1 + \nu \ln \frac{0.625}{\sqrt{\nu}}. \quad (1.78)$$

Общие замечания к вариационным оценкам для степенных потенциалов

Самое грубое приближение (относительно) для оценки физических величин в основном состоянии дает однопараметрическая пробная функция «гауссиан» $y = Ce^{-az^2/2}$. Она хороша в довольно широком интервале показателей степени в окрестности $\nu = 2$, для которого является собственной функцией при $a = 1$. Аналитический расчет с ее помощью дает достаточно простые явные выражения для всех величин. Из

двупараметрических пробных функций удобна $y = Ce^{-a|z|^k/2}$. Она обеспечивает хорошую точность для всех величин в диапазоне от $v=0$ до $v=10$, и величины частично просчитываются аналитически (по параметру a), так что остается численное варьирование лишь по параметру k . Впрочем, можно сразу варьировать оба параметра численно для сокращения процедуры вычислений. Более гибкой двупараметрической пробной функцией может служить $y = Ce^{-ax^2/2 - bx^{(1+v/2)}/2}$. Она автоматически подстраивается под соответствующее значение v , обеспечивая надлежащий ход в неклассической области движения. Все величины получаются очень близкими к точным, численным (в достаточно широком интервале v). Эти же замечания переносятся на случай вариационных оценок для 1-го возбужденного состояния, где пробные функции отличаются от используемых в основном состоянии лишь множителем z , обеспечивающим ортогональность точным волновым функциям основного состояния (независимо от того известны ли эти последние, или нет). Исключением служит функция (1.69), построенная по иному принципу. В связи с этим еще раз нужно подчеркнуть, что подобный подход для 2-го возбужденного состояния не годится, так как добавление перед функцией множителя $(z^2 - const)$, автоматически обеспечивающего ортогональность к ВФ 1-го возбужденного состояния требует

знания ВФ основного состояния, а ВФ этого-то состояния и неизвестна точно. Остается пытаться находить *const* из условия ортогональности к какому-либо приближенному выражению для ВФ основного состояния.

Хотя такое «двойное» приближение уже не будет давать обязательной оценки уровней энергии сверху, результаты оказываются достаточными для весьма широкого диапазона значений показателя степени ν (они подобны получаемым для 1-го возбужденного состояния).

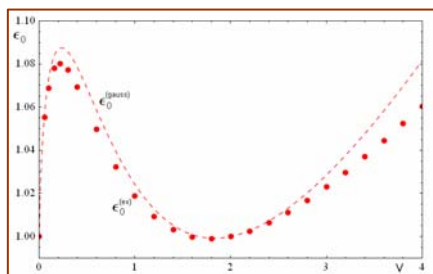
Добавим, что мы воспользовались пробными функциями лишь двух типов – гауссовского (1.22) и «косинусовского» (1.66). Однако есть много других возможностей. Например, очень хорошие результаты в интервале $0 < \nu < 2$, сравнимые с двухпараметрическими пробными ак-функциями (1.56), дают пробные функции Коши-Лоренцовского типа $y(z) = C / (z^2 + a^2)^q$. Здесь, как и в случае ак-функций, варьирование можно провести в два этапа: сначала зависимость от параметра a устанавливается аналитически, а далее можно либо подбирать параметр q только для особых ν (так, наилучшие результаты для $\nu < 1$ обеспечивает $q = 1.674$), либо

вести численный поиск минимума энергии по параметру q для всех показателей степени осцилляторов из интервала $0 < \nu < 2$.

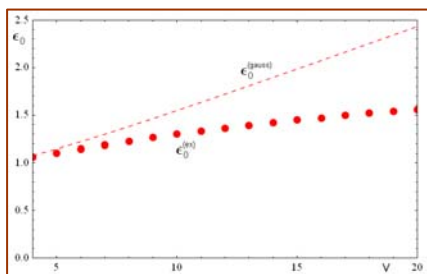
Хорошую точность обеспечивает также варьирование на основе функции Эйри в том же интервале, что естественно, так как она является собственной функцией для осциллятора с $\nu = 1$.

На графиках точные значения изображаются достаточно крупными точками, разделенными промежутками такой величины, чтобы были видны аппроксимации, наносимые обычно штриховыми линиями (гауссово приближение), штрих-пунктиром (двупараметрическая ak -аппроксимация), тонкой сплошной линией (двупараметрическая подстариваемая под ν $ab\nu$ -аппроксимация) и пунктиром (функции на интервале $c - \cos$).

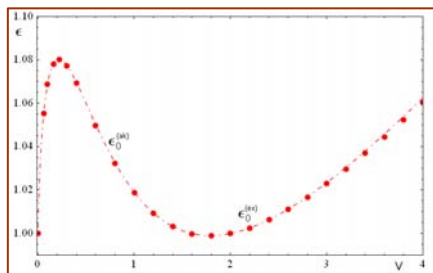
Таким образом, крупные точки численных значений играют роль «экспериментальных» данных по отношению к исследовательским «теоретическим» кривым различных аппроксимаций.



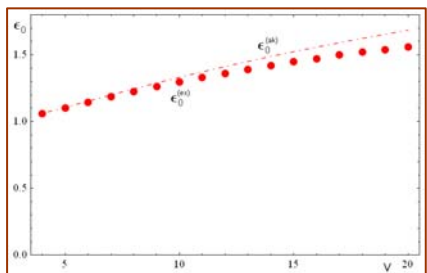
1



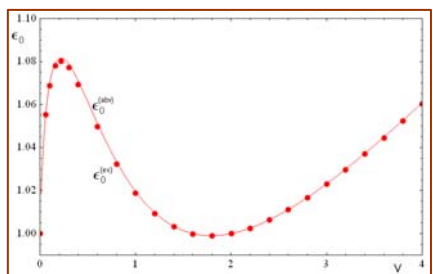
2



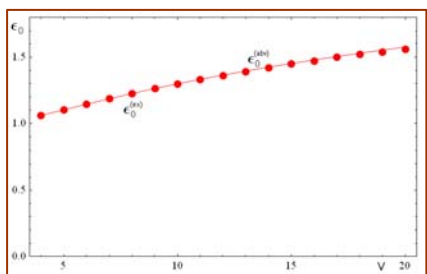
3



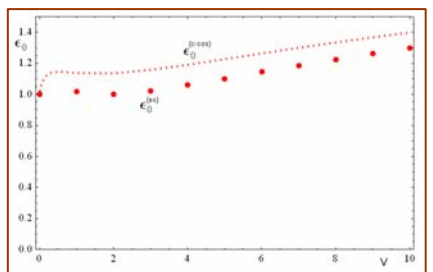
4



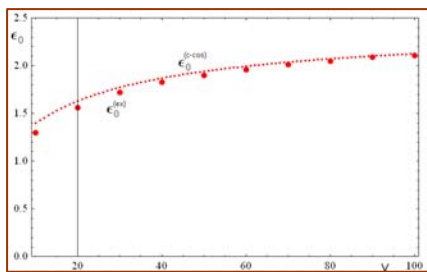
5



6

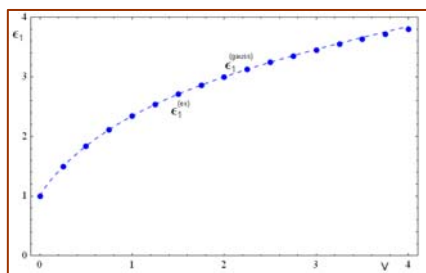


7

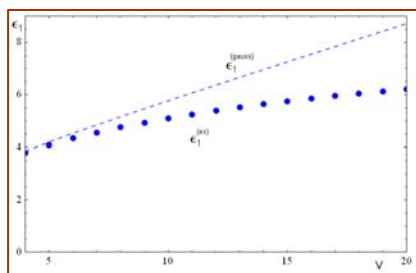


8

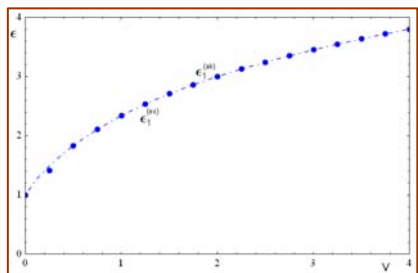
Рис. 17. Вариационные оценки энергии нулевых колебаний.



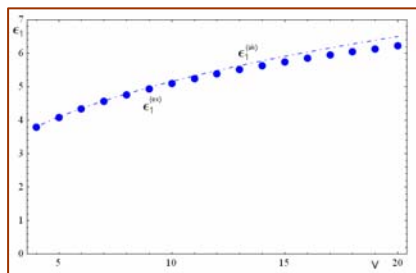
1



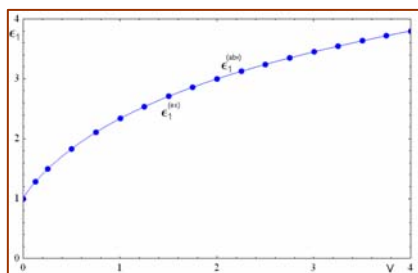
2



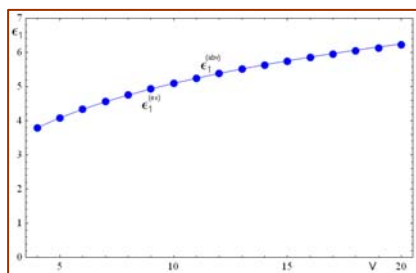
3



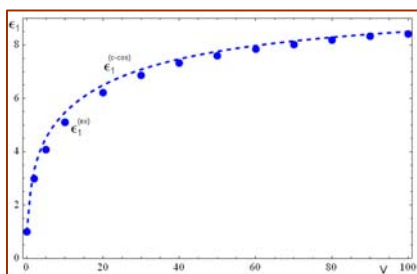
4



5

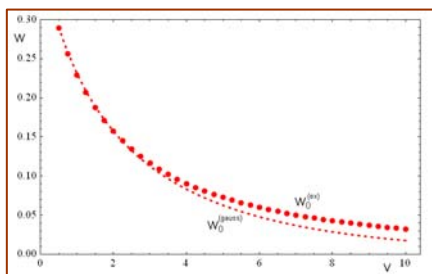


6

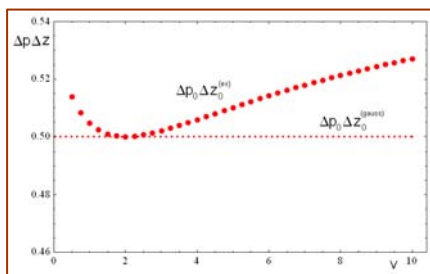


7

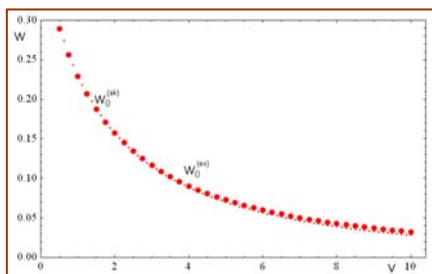
Рис. 18. Вариационные оценки энергии первого возбужденного состояния.



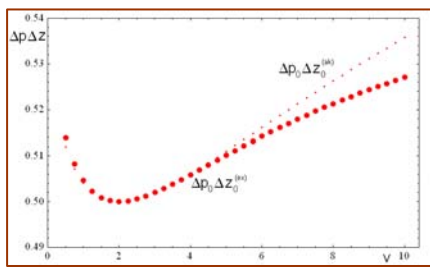
1



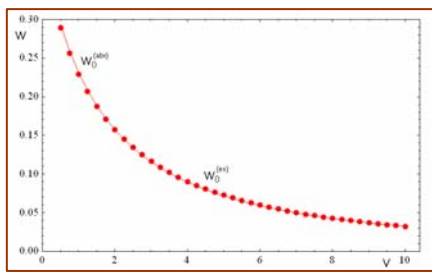
2



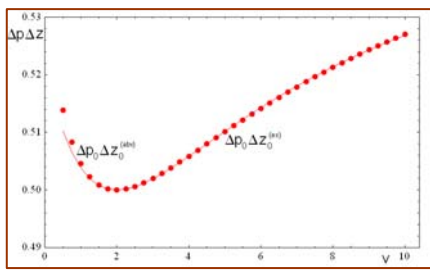
3



4

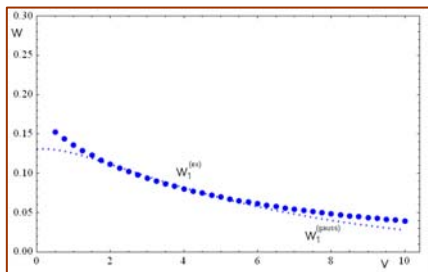


5

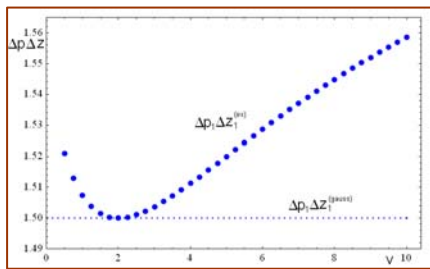


6

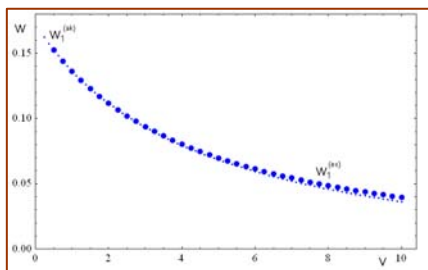
Рис. 19. Вариационные оценки вероятностей для неклассических областей и произведения импульсно-координатных неопределенностей в основном состоянии.



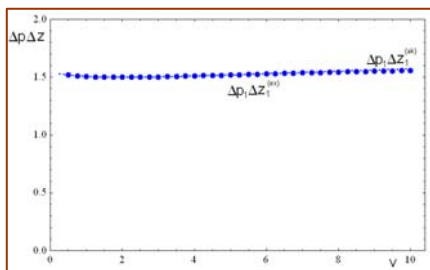
1



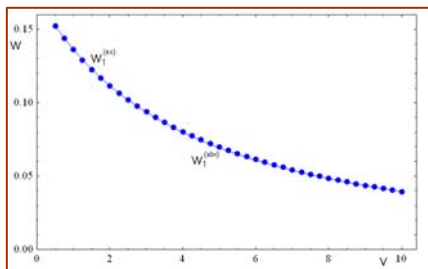
2



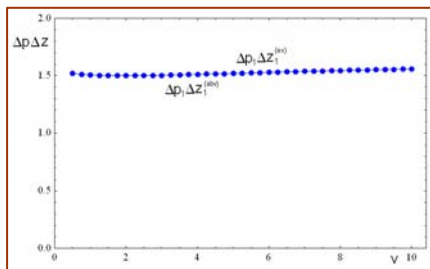
3



4

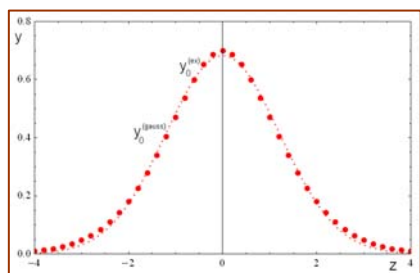


5

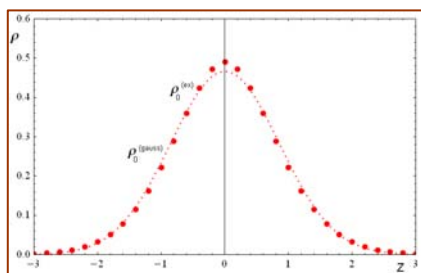


6

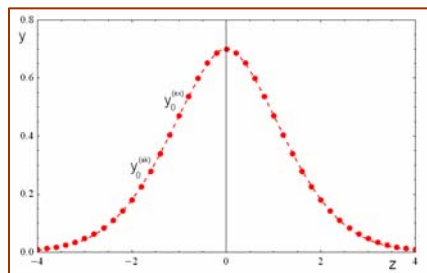
Рис. 20. Вариационные оценки вероятностей для неклассических областей и произведения импульсно-координатных неопределенностей в первом возбужденном состоянии.



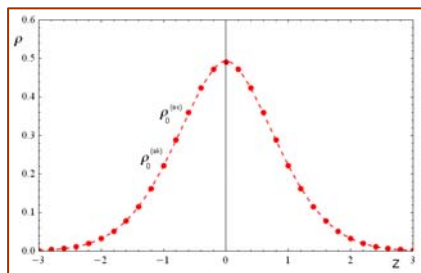
1



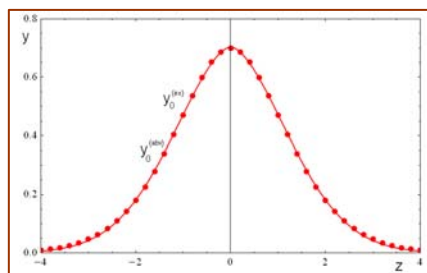
2



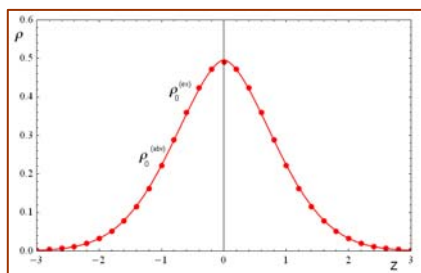
3



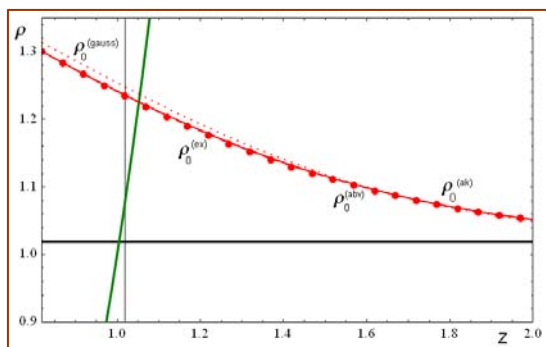
4



5

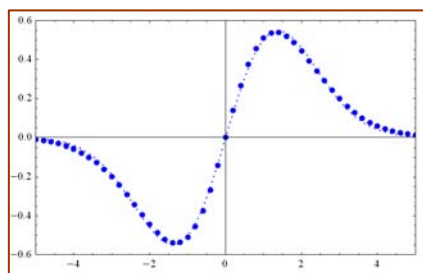


6

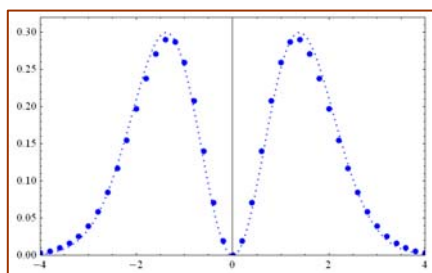


7

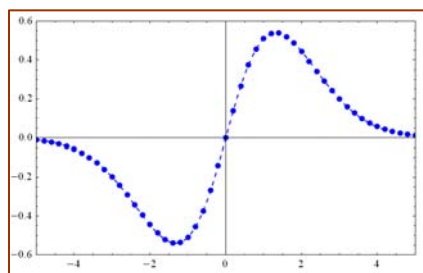
Рис. 21. Вариационные оценки волновых функций нулевых колебаний для линейного потенциала.



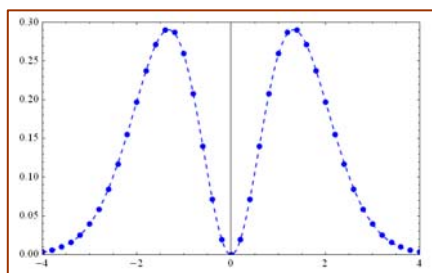
1



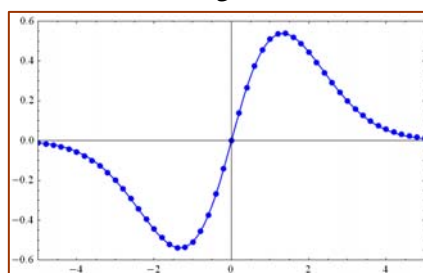
2



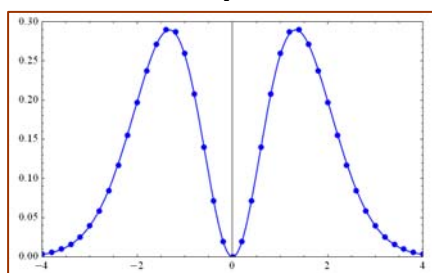
3



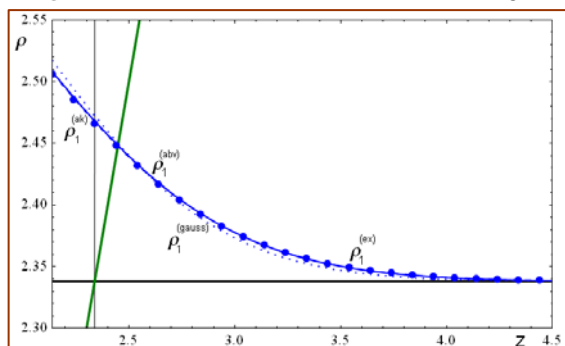
4



5

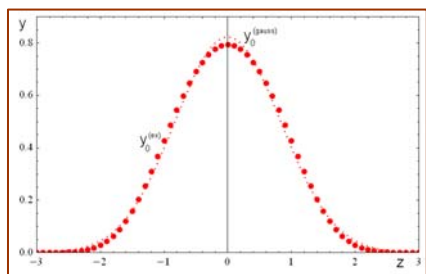


6

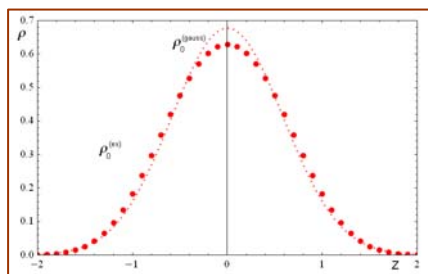


7

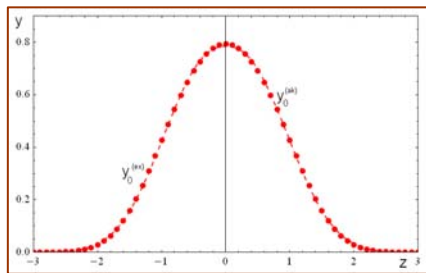
Рис. 22. Вариационные оценки волновых функций первого возбужденного состояния для линейного потенциала.



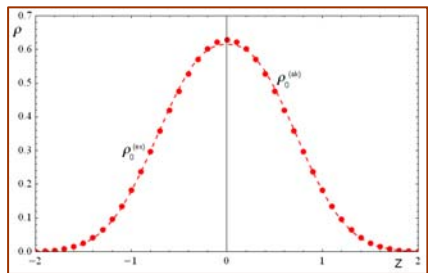
1



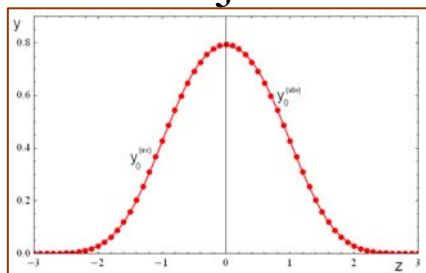
2



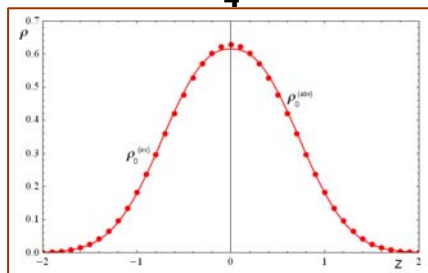
3



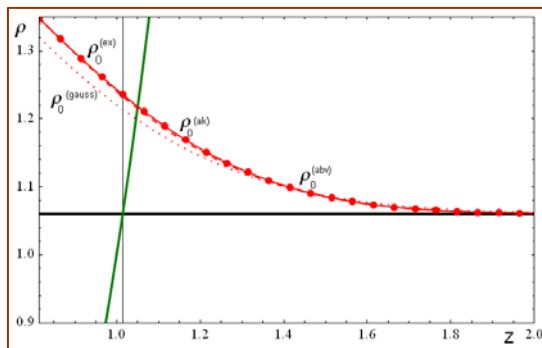
4



5

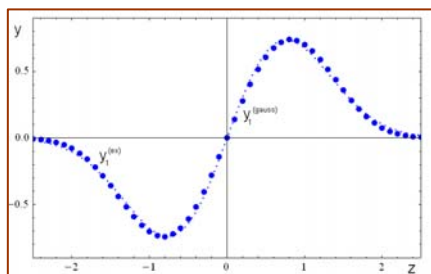


6

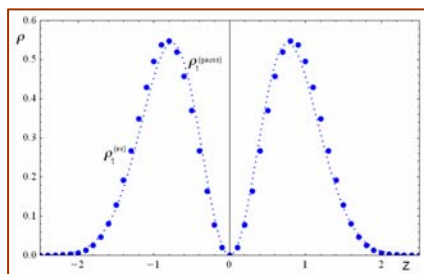


7

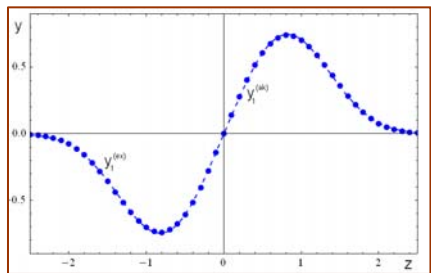
Рис. 23. Вариационные оценки волновых функций для нулевых колебаний четверного осциллятора.



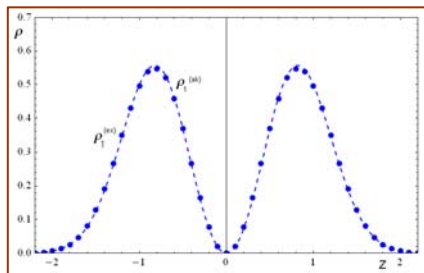
1



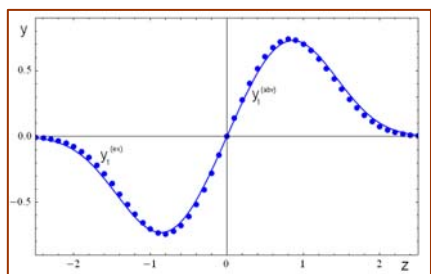
2



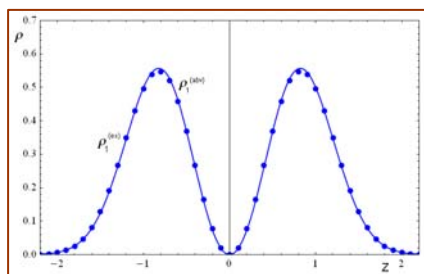
3



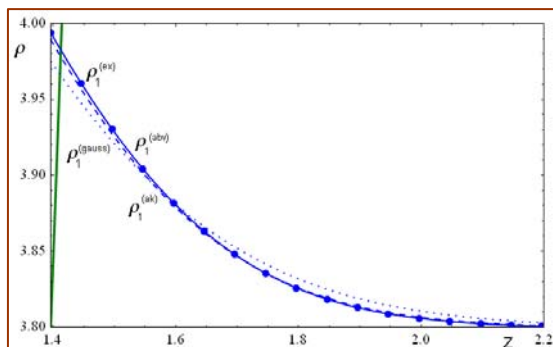
4



5



6



7

Рис. 24. Вариационные оценки волновых функций первого возбужденного состояния четвертого осциллятора.

Подведем некоторые итоги. Эффективность вариационного метода оценки уровней энергии, волновых функций и некоторых физических характеристик для основного и первого возбужденного стационарных состояний продемонстрирована на примере ангармонических осцилляторов с симметричным степенным потенциалом. Пробные функции, основанные на гауссовском и ему подобных распределениях, дают достаточно простые явные аналитические выражения для исследуемых величин. Они обеспечивают высокую точность в широких интервалах показателя степени, причем аппроксимации в совокупности покрывают весь диапазон его возможных значений и передают все тонкости поведения изучаемых характеристик. Продemonстрировано это как на рисунках с графиками, так и в численных сопоставлениях с точными результатами. Реализация вариационных методов в данном разделе книги в полной мере иллюстрирует заявленную идею воплощения сочетания аналитических, численных и графических методов компьютерного исследования. Полученные навыки общения с этими методами будут использованы в дальнейших разделах при изучении других объектов.

О литературе. Вопросам, связанным с вариационными методами и их конкретными приложениями, много внимания уделено в книге [4]. Там же можно найти многочисленные ссылки на литературные источники с общими представлениями о вариационных принципах и их историческом развитии, о разнообразных применениях вариационного подхода в квантовой теории.

1.5. Методы теории возмущений

*— Надо уметь довольствоваться малым,
дорогой майор, — возразил Гленарван.*

Жюль Верн

О роли теории возмущений в задаче об ангармонических осцилляторах. Прежде всего, отметим два вопроса, связанных с включением в наше рассмотрение теории возмущений. Первый случай — учет возможного небольшого отклонения от гармонического осциллятора в рамках чисто степенной зависимости потенциала от координаты, т. е. разложение по степеням $\nu - 2$. Это один пример учета слабой ангармоничности, когда потенциал не имеет минимума второго порядка, но отклонение от такового незначительно. Вторым случаем — потенциал имеет по-прежнему минимум второго порядка, но учитываются дополнительные члены в разложении вблизи минимума.

Итак, первый пример осциллятора с потенциалом $u(z) = |z|^\nu$ при $\nu \sim 2$, когда отклонение показателя степени потенциала от 2 играет роль поправки, а второй пример $u(z) = z^2 + \gamma z^4$, когда четвертый член играет роль поправки.

И в первом, и во втором случаях имеется, в свою очередь, некое раздвоение, тонкая структура задачи.

В первом примере можно либо сразу искать разложение энергии по степеням отклонения показателя степени от 2, т. е.

по $\nu-2$, либо считать возмущением изменение потенциала в целом, т. е. $|z|^\nu - z^2$.

Во втором примере обычно предполагается, что степенная поправка мала, но могут быть случаи, когда она не только не мала, но даже превалирует над квадратичным членом.

Добавим, что имеются и другие возможности. Например, можно учесть отклонение от линейного осциллятора, поскольку задача о таком осцилляторе имеет точное решение, на базе которого можно строить теорию возмущений. Далее можно рассмотреть в качестве возмущений отклонения показателя степени от нулевого и бесконечного значений, что было продемонстрировано в разделе о вариационном методе.

Перейдем к конкретным задачам. Итак, невозмущенная система – гармонический осциллятор – имеет в координатном представлении гамильтониан $\hat{h}_0 = \hat{p}^2 + z^2$, а возмущением является добавка $\hat{h}_1 = |z|^\nu - z^2$. Первая поправка к основному уровню энергии равна среднему значению гамильтониана возмущения по невозмущенному состоянию с волновой функцией

$$y_0(z) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-z^2/2),$$

так что

$$\Delta e_0^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} (|z|^v - z^2) y_0(z)^2 dz = \Gamma\left(\frac{1+v}{2}\right) / \sqrt{\pi} - \frac{1}{2}. \quad (1.79)$$

Любопытно, что уже в таком приближении улавливается тонкий эффект минимума энергии нулевых колебаний вблизи $v = 2$: $e_{0 \min}^{(1)} = 0.999648$ при $v_{\min} = 1.92326$. Точные значения $e_{0 \min} = 0.998994$ при $v_{\min} = 1.78675$.

Раскладываем полученную поправку по степеням $v - 2$ до квадратичного члена включительно. Тогда энергия нулевых колебаний в приближении первого порядка теории возмущений оказывается равной

$$e_0^{(1)} = 1 + 0.00912249(v - 2) + 0.0585084(v - 2)^2. \quad (1.80)$$

На рис.25-1-3-5 представлены графики, сравнивающие поведение нулевой энергии в таком приближении с точным в разных масштабах.

Далее переходим к расчету поправки второго приближения

$$\Delta e_0^{(2)} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{|h1_{0n}|^2}{e_0^{(0)} - e_n^{(0)}}, \quad \text{где суммирование ведется по четным}$$

номерам состояний невозмущенной системы, так как матричные элементы возмущения для нечетных номеров равны нулю. После удержания квадратичного члена в разложении этой суммы по степеням $v - 2$ она оказывается равной

$$\Delta e_0^{(2)} = -0.0394019(v - 2)^2. \quad (1.81)$$

Вместе с вкладом от первой поправки имеем результат

$$e_0^{(2)} = 1 + 0.00912249(v-2) + 0.0191065(v-2)^2. \quad (1.82)$$

В таком приближении $e_{0 \min}^{(2)} = 0.999007$ при $v_{\min} = 1.79211$, что существенно ближе к точному положению минимума. Даже при $v = 1$ относительная ошибка для этого приближения составляет $\delta = 1\%$, а при $v = 3$ она равна $\delta = -0.5\%$.

Графики на рис.25-2-4-6 иллюстрируют особенности учета второй поправки.

Второй конкретный расчет проведем для окрестности линейного потенциала. Невозмущенная $\hat{h}_0 = \hat{p}^2 + |z|$ система имеет в координатном представлении гамильтониан, а возмущением является добавка $\hat{h}_1 = |z|^v - |z|$. Первая поправка к основному уровню энергии равна среднему значению гамильтониана возмущения по невозмущенному состоянию, волновая функция которого сводится к функции Эйри: $y_0(z) = C \text{Ai}(|z| - e_0^{(0)})$, где $e_0^{(0)} = 1.018792972$ – энергия нулевых колебаний линейного потенциала (см. Приложение 2), а нормировочная постоянная

$$C = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \text{Ai}(|z| - e_0^{(0)})^2 \right)^{-1/2} = 1.307842741.$$

Искомая поправка равна

$$\Delta e_0^{(1)} = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} (|z|^{\nu} - |z|) \text{Ai}(|z| - e_0^{(0)})^2 dz. \quad (1.83)$$

Разложение по степеням $\nu - 1$ обрываем на квадратичном члене:

$$\Delta e_0^{(1)} = -0.0574093(\nu - 1) + 0.153591(\nu - 1)^2. \quad (1.84)$$

Квадратичный член в поправке второго порядка теории возмущений (расчет аналогичен случаю окрестности $\nu = 2$)

$$\text{имеет вид} \quad \Delta e_0^{(2)} = -0.103106(\nu - 1)^2. \quad (1.85)$$

Объединение с результатом первого приближения дает

$$e_0^{(2)} = e_0 - 0.574093(\nu - 1) + 0.0504857(\nu - 1)^2. \quad (1.86)$$

При $\nu = 0.5$ относительная ошибка для такого приближения составляет $\delta = -0.05\%$, а при $\nu = 2$ она равна $\delta = -1\%$.

На рис.26 показано поведение основного уровня энергии степенных потенциалов с учетом разных поправок в сравнении с точными значениями.

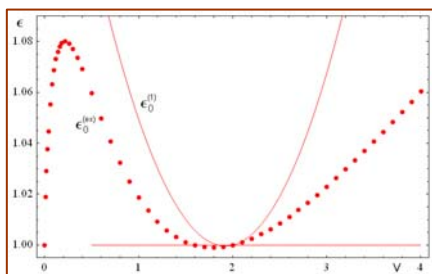
Приходим к заключению, что теория возмущений на базе линейного потенциала обеспечивает для основного уровня энергии хорошую аппроксимацию в интервале показателя степени $0.5 < \nu < 1.5$. Результат перекрывается с полученным на основе квадратичного потенциала вблизи $\nu = 1.5$, так что объединенное покрытие осуществляется в интервале $0.5 < \nu < 3$, где относительная ошибка по модулю не превышает 1%. Это демонстрирует рис. 26-4.

Далее следовало бы провести подобные расчеты для энергии первого возбужденного состояния, однако оставим это для самостоятельной проработки любознательному читателю.

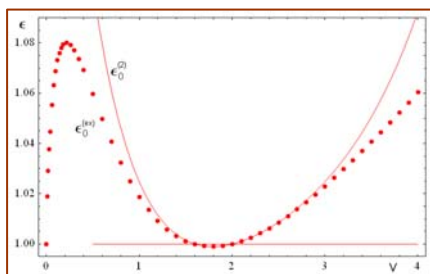
Добавим, что другие варианты использования метода теории возмущений еще будут встречаться в наших исследованиях, а здесь хотелось бы подчеркнуть связь этого метода с вариационным.

Теория стационарных возмущений основана на удачном разбиении гамильтониана на невозмущенную часть, для которой имеется полное точное решение задачи о стационарных состояниях, и добавочную часть, которая в некотором смысле оказывается малой.

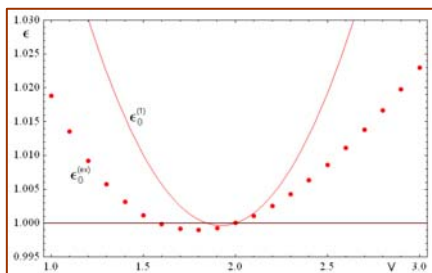
Вариационный же метод основан на удачном подборе волновой функции, которая является собственной для некоторого виртуального гамильтониана, а минимизация исходного гамильтониана соответствует минимизации разности между этими гамильтонианами, играющей роль поправки первого порядка теории возмущений.



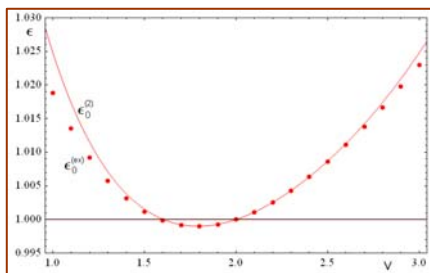
1



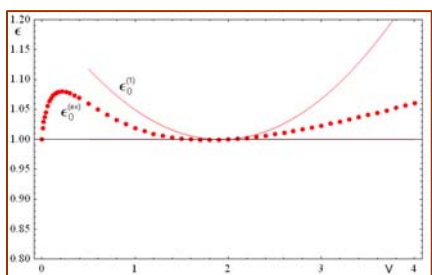
2



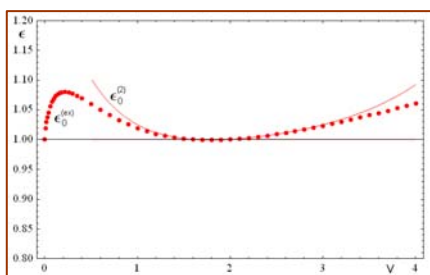
3



4

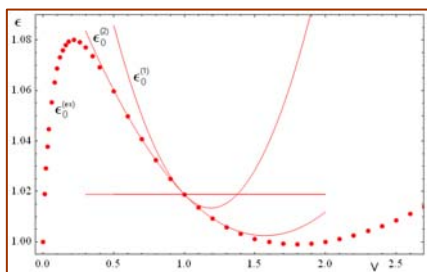


5



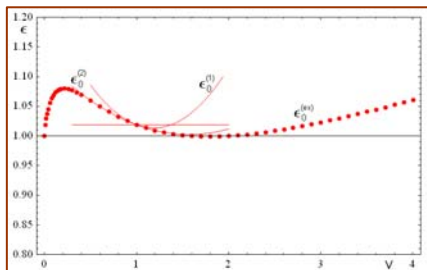
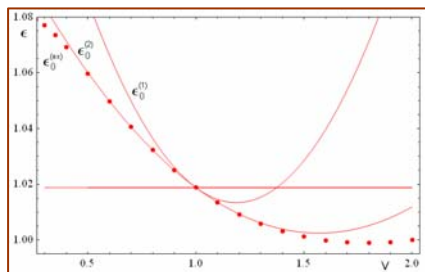
6

Рис. 25. Теория возмущений в приложении к энергии нулевых колебаний для окрестности квадратичного потенциала в разных масштабах: 1-3-5 – первое приближение, 2-4-6 – второе приближение.



1

2



3

4

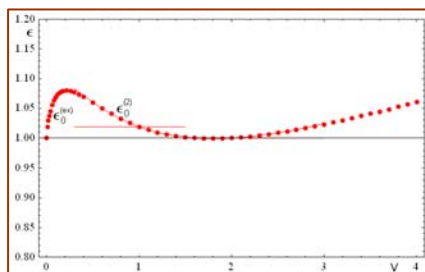


Рис. 26. Теория возмущений в приложении к энергии нулевых колебаний для окрестности линейного потенциала: 1-2-3 – первое и второе приближения в разных масштабах, 4 – второе приближение с перекрытием для квадратичного.

Теперь вернемся к вопросу об осцилляторе со слабой ангармоничностью, когда разложение потенциальной энергии вблизи минимума имеет вид $u(z) = z^2 + \gamma z^4$. (1.87)

Особенность данной задачи состоит в возможности сопоставления теории возмущений с квазиклассикой. Можно идти двумя путями. Если начать с результатов теории возмущений [1]

$$e_n = (2n+1) + \frac{3}{2}\gamma(n^2 + n + \frac{1}{2}), \quad (1.88)$$

то далее можно выделить в ангармонической поправке вклад второго квазиклассического приближения:

$$e_n = (2n+1) + \frac{3}{2}\gamma[(n + \frac{1}{2})^2 + \frac{1}{4}].$$

Если же вначале исходить из квазиклассических правил квантования энергии

$$\oint pdz - \frac{1}{12} \frac{d^2}{de^2} \oint u'' pdz = \pi(n + 1/2),$$

то необходимо далее приближенно вычислить соответствующие фазовые интегралы. В первом приближении получаем

$$\oint pdz = \frac{\pi e}{2} (1 - \frac{3}{8}\gamma e). \quad (1.89)$$

Отсюда вытекает формула $e_n^{(1)} = (2n+1) + \frac{3}{2}\gamma(n + \frac{1}{2})^2$. (1.90)

Затем идет расчет поправки второго квазиклассического приближения:

$$-\frac{1}{12} \frac{d^2}{de^2} \int pu'' dz = -\frac{3\pi}{16} \gamma. \quad (1.91)$$

Это дает как раз то же самое выражение, что и по теории возмущений:

$$e^{(2)} = e^{(1)} + \frac{3}{8} \gamma. \quad (1.92)$$

Таким образом, первое квазиклассическое приближение не улавливает ангармонизма полностью, но уже второе квазиклассическое приближение позволяет учесть весь ангармонизм в указанном приближении теории возмущений. При этом поправки ко всем уровням энергии оказываются одинаковыми, так что расстояния между уровнями энергии целиком передаются первым квазиклассическим приближением, а второе приближение учитывает общее смещение всей системы уровней энергии.

Для нулевой энергии второе квазиклассическое приближение дает половину ангармонизма.

Для относительной ошибки первого квазиклассического приближения получаем выражение

$$\delta_n = -\frac{3}{8} \gamma / (n + 1/2). \quad (1.93)$$

Отличие от соответствующих выражений для степенных потенциальных полей с сильной ангармоничностью состоит в том, что эта ошибка медленнее убывает с увеличением энергии (ведь с ростом энергии увеличивается и ангармонизм): в данном случае $\delta_n \sim 1/(n+1/2)$, тогда как для степенных осцилляторов с сильным ангармонизмом

$$\delta_n \sim 1/(n+1/2)^2. \quad (1.94)$$

Итак, для ангармонического осциллятора со слабой нелинейностью искажение эквидистантной структуры спектра целиком улавливается первым квазиклассическим приближением, а второе квазиклассическое приближение уточняет абсолютное расположение всей системы уровней (уточняет энергию нулевых колебаний). Третье квазиклассическое приближение не требуется вовсе.

Для несимметричного потенциала можно учесть кубический член в разложении (1.87). При этом основные выводы остаются в силе, но явный вид всех поправок по теории возмущений и по квазиклассическому квантованию энергии доверим получить любознательному читателю.

1.6. Двухстепенные и несимметричные потенциалы

*– Идем дальше! – воскликнул Гленарван,
любопытство которого разгорелось до крайности.
Жюль Верн*

Одним из обобщений рассмотренных степенных симметричных потенциалов являются симметричные двухстепенные потенциальные поля вида

$$U(z) = \left| z_0^{v_1} - z^{v_1} \right|^{v_2}. \quad (1.95)$$

В отличие от чисто степенных моделей (1.5), они имеют изменяющийся параметр z_0 (для каждой фиксированной пары v_1, v_2), что придает каждой модели гибкость и наделяет ее особыми квантовыми свойствами. При этом важно проследить за деформациями потенциала и соответствующими изменениями структуры энергетического спектра. Наиболее наглядно это достигается с помощью созданных нами анимационных демонстраций (см. соответствующее приложение на компакт-диске).

При $z_0 = 0$ двухстепенные потенциалы превращаются в одностепенные с показателем степени $\nu = v_1 \cdot v_2$.

Качественное отличие от чисто степенных осцилляторов – появление новой особенности в виде двойных потенциальных ям с туннельным расщеплением уровней энергии, что будет предметом рассмотрения в следующем разделе монографии.

Среди множества пар значений показателей степеней (ν_1, ν_2) можно отметить следующие:

- 1) $\nu_1 = 1/2; \nu_2 = 1/2$; $U(z) = \sqrt{|\sqrt{z_0} - \sqrt{z}|}$;
- 2) $\nu_1 = 1; \nu_2 = 1/2$; $U(z) = \sqrt{|z_0 - z|}$;
- 3) $\nu_1 = 1; \nu_2 = 1$; $U(z) = |z_0 - z|$;
- 4) $\nu_1 = 1; \nu_2 = 2$; $U(z) = (z_0 - |z|)^2$;
- 5) $\nu_1 = 2; \nu_2 = 1/2$; $U(z) = \sqrt{|z_0^2 - z^2|}$;
- 6) $\nu_1 = 2; \nu_2 = 1$; $U(z) = |z_0^2 - z^2|$;
- 7) $\nu_1 = 2; \nu_2 = 2$; $U(z) = (z_0^2 - z^2)^2$; (1.96)
- 8) $\nu_1 = 2; \nu_2 = 4$; $U(z) = (z_0^2 - z^2)^4$;
- 9) $\nu_1 = 4; \nu_2 = 1$; $U(z) = |z_0^4 - z^4|$;
- 10) $\nu_1 = 4; \nu_2 = 2$; $U(z) = (z_0^4 - z^4)^2$.

Эти случаи представлены на рис. 27. Заметим, что пять из них являются кусочно-степенными (номера 2, 3, 4, 6 и 9). Некоторые из отмеченных потенциалов в качестве примеров станут далее объектом нашего более подробного исследования, тогда как другие читатель может изучить самостоятельно. То же касается и иных упоминаемых далее потенциальных полей.

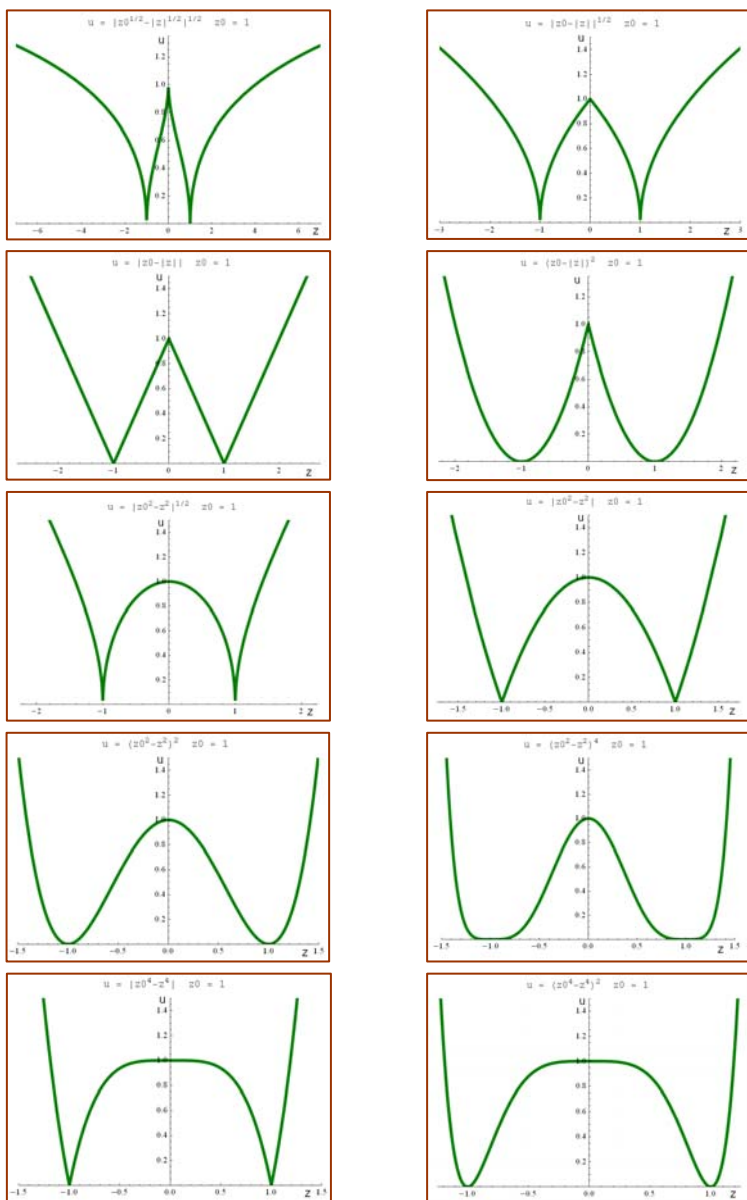


Рис. 27. Двухстепенные симметричные потенциалы

$$U(z) = \left| z_0^{v_1} - |z|^{v_1} \right|^{v_2}.$$

К указанному множеству потенциальных форм примыкает модель

$$U(z) = z^2 + 2z_0 |z|, \quad (1.97)$$

которая также является кусочно-степенной (кусочно-квадратичной) и симметричной (рис.28-4).

Можно добавить также аналогичную модель

$$U(z) = z^4 + z_0 |z|, \quad (1.98)$$

которая также является симметричной, но разностепенной.

Далее отметим некоторые несимметричные одно- и разностепенные потенциалы.

Несимметричный кусочно-квадратичный потенциал (рис.28-1)

$$\begin{aligned} U(z) &= z^2 \theta(-z) + d \cdot z^2 \theta(z) = \\ &= z^2 [\theta(-z) + d \cdot \theta(z)]. \end{aligned} \quad (1.99)$$

Здесь и далее функция Хэвисайда

$$\theta(z) = \begin{cases} 1, & z > 0, \\ 0, & z < 0. \end{cases} \quad (1.100)$$

Несимметричный кусочно-линейный потенциал (рис.28-2)

$$\begin{aligned} U(z) &= z \theta(-z) + d \cdot z \theta(z) = \\ &= z [\theta(-z) + d \theta(z)] . \end{aligned} \quad (1.101)$$

Несимметричный линейно-квадратичный потенциал (рис.28-3)

$$U(z) = z^2 \theta(-z) + d \cdot z \theta(z) . \quad (1.102)$$

Несимметричный кусочно-квадратичный потенциал со скачком (рис.28-4) $U(z) = z^2\theta(-z) + (z^2 + u_0)\theta(z)$. (1.103)

Несимметричный кусочно-линейный потенциал со скачком (рис.28-5) $U(z) = -z\theta(-z) + (z + u_0)\theta(z)$. (1.104)

Последние пять моделей (а также 1.97) отличаются тем, что для них существуют достаточно простые точные решения, хотя и неявные (для уровней энергии нужно решать соответствующие уравнения численно, а затем использовать эти решения для явного построения волновых функций стационарных состояний).

Наконец, от нелокальных потенциалов разного вида, т. е. имеющих только дискретный энергетический спектр в силу свойства $U \rightarrow \infty$ при $|z| \rightarrow \infty$, переходим к потенциальным полям, обладающим, наряду с (возможными) дискретными уровнями энергии, непрерывным энергетическим спектром.

Например, квадратично-постоянная модель (рис.28-7)

$$U(z) = z^2\theta(-z) + u_0\theta(z), \quad (1.105)$$

иллюстрирующая возможное исчезновение связанного состояния на фоне невырожденного энергетического спектра.

Аналогом может служить модель с линейным фрагментом

$$U(z) = z\theta(-z) + u_0\theta(z). \quad (1.106)$$

Обе отличаются тем, что допускают точное решение для (возможных) дискретных уровней энергии, хотя и неявное.

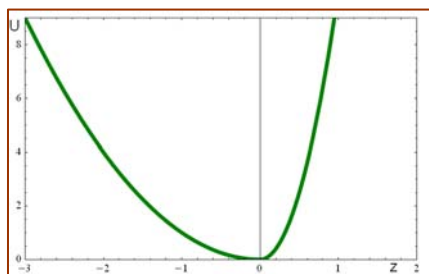
Сюда же примыкают модели с двукратно вырожденным непрерывным энергетическим спектром, иллюстрирующие «живучесть» связанных состояний в как угодно слабом одномерном потенциальном поле в виде ямок:

модель параболическая (рис.28-8)
$$U(z) = \begin{cases} z^2, & |z| < z_0, \\ u_0, & |z| > z_0, \end{cases} \quad (1.107)$$

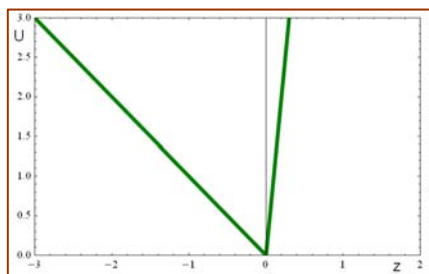
а также соответствующая линейная
$$U(z) = \begin{cases} |z|, & |z| < z_0, \\ u_0, & |z| > z_0. \end{cases} \quad (1.108)$$

Все указанные виды потенциальных полей являются различными вариантами обобщений подробно рассмотренных нами симметричных степенных потенциалов. Они отличаются наличием особенностей: асимметрия, изломы и скачки.

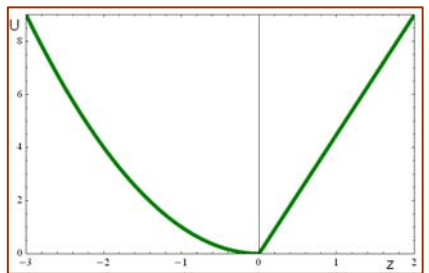
Последние четыре примера (1.105-1.108) перебрасывают мостик ко второй нашей книге, где будут обсуждаться вопросы, относящиеся к непрерывному энергетическому спектру: существование и вытеснение связанных состояний, особенности рассеяния частиц в стационарных состояниях и резонансные явления в различного рода потенциальных ловушках.



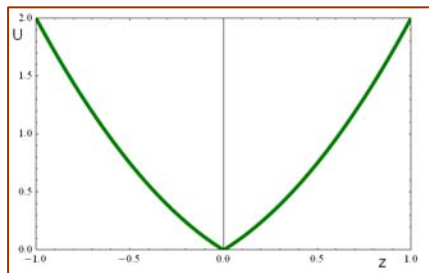
1



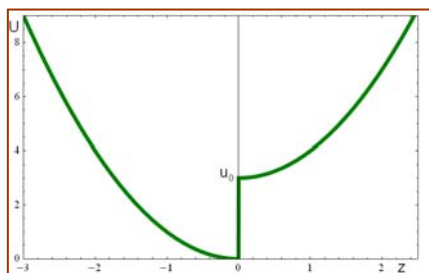
2



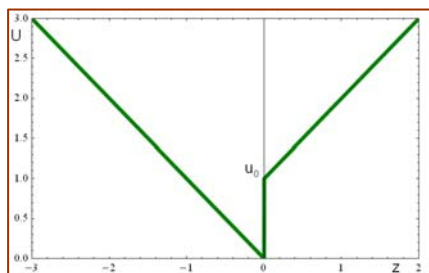
3



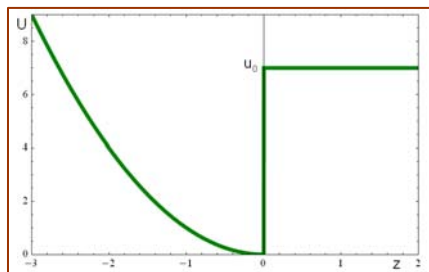
4



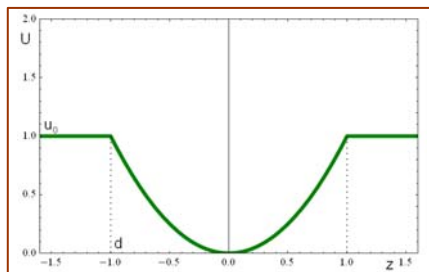
5



6



7



8

Рис. 28. Некоторые несимметричные (1-3, 5-7) и кусочно-степенные потенциалы (4, 8).

1.7. Итоговые замечания по первому разделу

Пустынные равнины чередовались с девственными лесами.
Жюль Верн

Рассмотрены закономерности движения квантовых частиц с квадратичным законом дисперсии в одномерных эффективных степенных симметричных потенциальных полях. Изучаются особенности степенных потенциалов как ангармонических осцилляторов, исследуется структура энергетического спектра во всем диапазоне значений показателя степени потенциалов.

Применяются квазиклассические и вариационные методы, теория возмущений, а также численные расчеты и графические представления.

Обнаружены любопытные особенности поведения основного уровня энергии в области небольших значений показателя степени и установлено предельное поведение всех уровней энергии при больших его значениях. Изучены вероятности для неклассических областей движения. Исследовано поведение произведения неопределенностей для импульса и координаты в стационарных состояниях.

Для визуализации полученных результатов созданы анимационные демонстрации, а также презентация, содержащая большое число цветных иллюстраций.

2. ТУННЕЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ

*Отдышавшись, Данилов показал себе рукой
направление. И куда показал, туда и полетел.
Владимир Орлов («Альтист Данилов»)*

В данном разделе речь пойдет об интересном квантовом явлении туннельного расщепления энергии. Обычно рассматривают симметричный случай двух одинаковых потенциальных ям, разделяемых некоторым симметричным барьером [1]. Однако расщепление из-за туннелирования происходит и в несимметричных случаях.

Физическим объяснением расщепления во всех случаях является туннелирование в сочетании с невырожденностью одномерного энергетического спектра связанных состояний, однако причины появления энергетической щели оказываются различными. Если в первом случае совпадение уровней энергии в изолированных ямках происходит из-за симметрии и касается всех подбарьерных энергий, то в несимметричном случае оно обязано спорадическому наложению некоторой пары уровней энергии в различных ямках, что можно проследить в деталях на конкретных примерах в процессе деформации, например, одной из частей потенциала (или профиля потенциальной энергии в целом). При этом возникает своеобразный эстафетный обмен уровнями энергии в ямках. К тому же для каждой пары в симметричном случае мы имеем дело с фиксированной щелью, тогда как в несимметричном щель может иметь разные размеры

вплоть до некоторой минимальной (как и во всех случаях “отталкивания” уровней энергетических “термов” при учете возмущений, снимающих формальное двукратное вырождение; в рассматриваемых случаях таким возмущением является туннелирование).

Таким образом, предметом изучения является один из наиболее ярких чисто квантовых эффектов – расщепление уровней энергии за счет другого чисто квантового эффекта – туннелирования. На фоне еще одного также чисто квантового эффекта – дискретной структуры уровней энергии.

Обсуждаемая ситуация возникает во многих физических системах, в частности в наноструктурных образованиях.

Описать подобные явления помогают аналитические исследования с помощью соотношений, полученных одним из авторов в работе [5] на основе квазиклассических методов (здесь оказывается возможным подключение и второго квазиклассического приближения), а также численные и графические методы.

Рассмотрим конкретные примеры туннельного расщепления в различных потенциальных полях, включая встречающиеся в теории квазиточнорешаемых моделей спинового происхождения [6, 7], а также среди потенциалов солитонной природы [6]. Будут изучены различные случаи расщепления энергии и выведены соответствующие формулы для несимметричных

потенциалов, а также обобщены известные результаты для симметричных полей. Замечу, что мы ограничиваемся рассмотрением только двухъямных потенциалов.

Вначале мы сделаем качественные замечания относительно особенностей туннельного расщепления в симметричных случаях, перенеся все количественные результаты, а также общее исследование несимметричных случаев в последующие части.

2.1. Расщепление в двухъямных потенциалах

*Всем ужасно интересно,
Что там спрятано внутри.
Григорий Остер*

На рис. 29 показаны некоторые профили подобных симметричных потенциальных полей с условным выделением некоторой пары уровней, образовавшейся за счет расщепления.

Эти потенциалы имеют различное происхождение: кусочно-постоянные модели (прямоугольные) рис.29-а, степенные куполы, зажатые в непроницаемых границах рис.29-б-с, кусочно-линейные рис.29-д, кусочно-квадратичные рис.29-е, степенные (квадратично-четверные) рис.29-ф, гиперболические (квазиточнорешаемые модели спиновой природы) рис.29-г,

локализованные потенциалы солитонного происхождения
рис. 29-h.

Почти все выбранные модели потенциалов, изображенные на рис.29, допускают достаточно простое аналитическое решение уравнения Шредингера с волновыми функциями в явном виде и с уровнями энергии, получаемыми из точных соотношений в виде корней некоторого уравнения. Исключением является квадратично-четверной профиль (рис.29-f). Солитонный случай (рис.29-h) занимает особое положение: там уровни энергии можно задавать точно, по своему усмотрению. Это позволяет оценивать эффективность получаемых формул для энергетических щелей. К тому же в каждом случае имеется возможность непосредственного численного расчета уровней энергии.

Для расчета энергетических щелей в случае симметричных потенциалов часто пользуются формулой, приведенной в [1], которую будем в дальнейшем называть формулой Ландау:

$$\Delta E = \frac{\hbar \omega_{кл}}{\pi} \exp \left(- \int_{x_2}^{x_3} |k| dx \right), \quad (2.1)$$

где классическая циклическая частота колебаний частицы в отдельной ямке $\omega_{кл}$, волновое число k и пределы интеграла в виде прибарьерных классических точек поворота x_2 и x_3

зависят от полной энергии частицы E , расщеплением которой интересуются.

Эта формула достаточно хорошо описывает расщепление уровней энергии в случае слабой прозрачности и плавного поведения потенциального барьера, разделяющего ямки, однако в ряде случаев требуется внесение существенных поправок. Вывод же формулы (2.1), приведенный в [1], не дает возможности провести ее уточнения и обобщения. Наиболее адекватным представляется подход, сочетающий квазиклассическое решение с точным вблизи особенностей потенциала [5]. Тем самым удастся не только наглядно истолковать все входящие в результирующие формулы величины, но и получить дальнейшие уточнения, что позволяет также дать оценки точности результатов.

Результаты подобных уточнений, подробности вывода которых будут изложены далее, сводятся к следующему.

Во-первых, экспоненциальный множитель должен быть заменен при слабой прозрачности барьера корнем квадратным из коэффициента прозрачности барьера \sqrt{T} . В большинстве случаев такая величина действительно сводится в первом квазиклассическом приближении к фигурирующей в формуле (2.1) экспоненте, однако для некоторых барьеров может оказаться весьма существенным теряемый при этом предэкспоненциальный множитель. К тому же, учет второго

квазиклассического приближения при расчете коэффициента прозрачности вносит дополнительные поправки в экспоненте.

Во-вторых, классическая частота $\omega_{кл}$ должна быть заменена величиной $2\pi/\tau$, где τ является квантовым обобщением классического периода колебаний (к последнему прибавляются некоторые добавочные квантовые члены [5]).

Таким образом, с учетом указанных изменений формула для энергетических щелей приобретает следующий вид:

$$\Delta E = \frac{2\hbar\sqrt{T}}{\tau}. \quad (2.2)$$

Чтобы оценить точность формулы (2.2), при расчете энергетических спектров выбранных моделей потенциалов можно использовать следующие методы в соответствующих ситуациях: точные решения уравнения Шредингера на основе тригонометрических функций (рис.29-а), функций Эйри (рис.29-б,д) или функций параболического цилиндра (рис.29-с,е) с последующими численными расчетами, численные решения уравнения Шредингера для данной потенциальной конфигурации (рис.29-а-г), метод численного расчета собственных значений матрицы спинного гамильтониана (рис.29-г), метод усеченной матрицы гамильтониана (рис.29-с,ф) (в представлении гармонического осциллятора или бесконечной прямоугольной ямы).

Все симметричные модели, представленные на рис.29, допускают простые деформации, приводящие к несимметричным потенциалам. Так, модель с прямоугольным барьером (рис. 29-а) можно видоизменить либо углубляя одну из ямок, либо расширяя ее.

Аналогичным образом трансформируются и другие модели. Таким образом, получаем весьма разнообразное множество простых профилей потенциалов для дальнейшего изучения туннельного расщепления в несимметричных ситуациях, которое предполагается рассмотреть далее.

На рис.30 показаны некоторые профили подобных несимметричных потенциальных полей с условным выделением некоторой пары уровней, образовавшейся за счет расщепления в определенной ситуации деформирования данного потенциала, а также с указанием уровня энергии основного состояния, фактически локализованного в одной из ямок.

В книге не ставится цель подробного изучения каждой из приведенных моделей, как и других аналогичных.

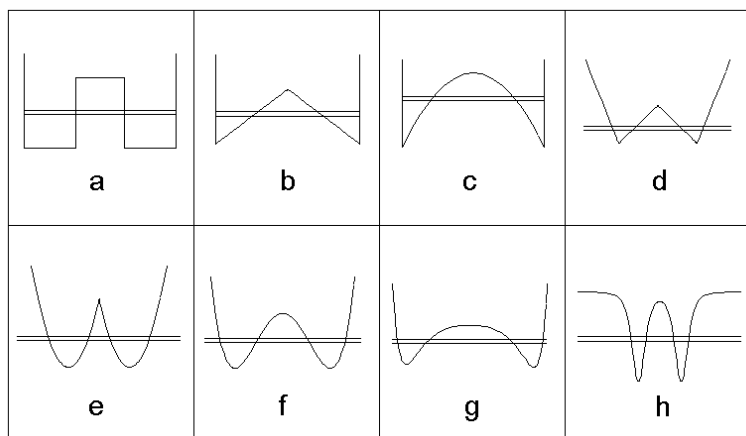


Рис. 29. Некоторые симметричные потенциальные модели:
 а - прямоугольная, б - линейная с непроницаемыми стенками,
 с - квадратичная с непроницаемыми стенками, d - кусочно-линейная,
 е - кусочно-квадратичная, f - квадратично-четвертая,
 g - гиперболическая, h – солитонная.

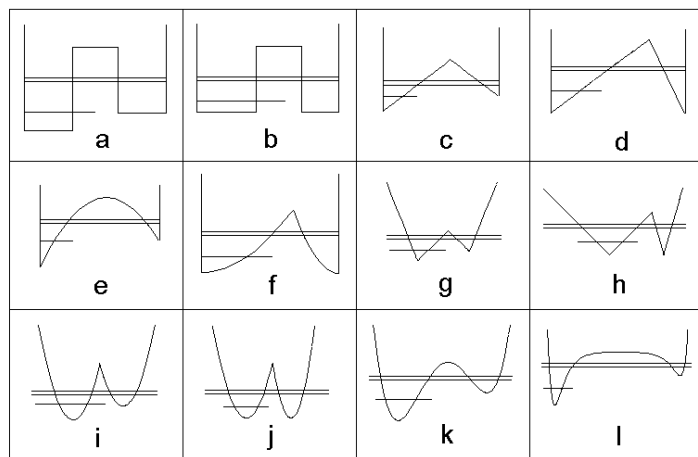


Рис. 30. Некоторые несимметричные потенциальные модели:
 а и б - прямоугольные, с и d - линейные с непроницаемыми стенками,
 е и f - квадратичные с непроницаемыми стенками, g и h - кусочно-линейные, i и j - кусочно-квадратичные, k - квадратично-кубично-четвертая, l - гиперболическая.

Для иллюстрации общей ситуации будут выбраны отдельные примеры.

Начнем же с описания структуры энергетического спектра для произвольной формы двухъямной потенциальной энергии. Связь квазиклассической волновой функции в отдельных ямках удобно осуществить методом матрицы связи локальных решений (трансфер-матрицы, или оператора перехода через потенциальный барьер), матричные элементы которой представляются через свои модули $|G_{21}|$, $|G_{22}|$ и фазовые добавки φ_{21} и φ_{22} [5].

В результате (подробности см. в подразделе “Структура спектра в потенциальной яме с внутренней особенностью” из [5]) приходим к общему уравнению для уровней энергии, из которого вытекают как поведение отдельных ветвей энергетического спектра, так и выражение для энергетической щели при сближении “термов”:

$$\cos(S_1 + S_2 - \varphi_{22}) = - \frac{|G_{21}|}{|G_{22}|} \cos(S_1 - S_2), \quad (2.3)$$

где величины

$$S_1 = \int_1 k dx - \alpha_1 + \frac{1}{2} \varphi_{21} + O(\hbar) \quad \text{и} \quad S_2 = \int_2 k dx - \alpha_2 + \frac{1}{2} (\pi - \varphi_{21}) + O(\hbar)$$

содержат так называемые граничные фазы α_1 и α_2 , учитывающие особенности поведения потенциала вблизи внебарьерных классических точек поворота [5], индексы 1 и 2

нумеруют ямки, а квантовые добавки $O(\hbar)$ пока явно не выписываются, чтобы не загромождать формул, но они фактически получены в [5].

Входящее в правую часть (2.3) отношение модулей матричных элементов согласно [5] равно корню квадратному из коэффициента отражения \sqrt{R} . Для описания туннельного расщепления целесообразно преобразовать эту формулу к виду

$$\cos(S_1 - \frac{1}{2}\varphi_{22})\cos(S_2 - \frac{1}{2}\varphi_{22}) = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{R})\cos(S_1 - S_2). \quad (2.4)$$

В условии пренебрежения возможностью туннелирования, т. е. при полном отражении $R=1$, получаем из (2.4) правила квантования энергий E_n и E_m для двух независимых ветвей энергетического спектра, отвечающих отдельным ямкам:

$$S_1 - \frac{1}{2}\varphi_{22} = \pi(n + \frac{1}{2}), n=0,1,\dots \quad \text{и} \quad S_2 - \frac{1}{2}\varphi_{22} = \pi(m + \frac{1}{2}), m=0,1,\dots,$$

в частности, при пересечении этих ветвей, т. е. при совпадающих энергиях $E_n = E_m = E^0$.

При выбранных ветвях спектра n и m имеем систему двух уравнений

$$\begin{aligned} S_1^0 - \frac{1}{2}\varphi_{22}^0 &= \pi(n + \frac{1}{2}), \\ S_2^0 - \frac{1}{2}\varphi_{22}^0 &= \pi(m + \frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (2.5)$$

для двух величин: E^0 и того значения параметра потенциала, при котором эти ветви пересекаются.

Полагая отличие от нерасщепленного значения энергии $\delta E = E - E^0$ малым и производя разложение обеих частей уравнения (2.4), с учетом малости прозрачности барьера

$T=1-R \ll 1$, так что $1-\sqrt{R} \approx T/2$, получаем выражение для полуширины щели (все величины относятся к значению энергии E^0 , однако специальных значков указывать не будем)

$$\delta E = \pm \hbar \sqrt{\frac{T}{\tau_1 \tau_2}}. \quad (2.6)$$

Отсюда для энергетической щели $\Delta E = 2\delta E$ вытекает формула

$$\Delta E = 2\hbar \sqrt{\frac{T}{\tau_1 \tau_2}}, \quad (2.7)$$

в которой величины

$$\tau_1 = \tau_1^{\kappa l} - 2\hbar \frac{d\alpha_1}{dE} + \hbar \frac{d\varphi_{21}}{dE} - \hbar \frac{d\varphi_{22}}{dE} + O(\hbar^2)$$

и

$$(2.8)$$

$$\tau_2 = \tau_2^{\kappa l} - 2\hbar \frac{d\alpha_2}{dE} - \hbar \frac{d\varphi_{21}}{dE} - \hbar \frac{d\varphi_{22}}{dE} + O(\hbar^2)$$

являются обобщениями классических периодов колебаний в отдельных ямках (первые слагаемые) и содержат квантовые поправочные члены двоякой природы. Фазовые поправки оказываются существенными, во-первых, в области энергий, близких к максимуму разделяющего ямки барьера (так называемый “критический” диапазон), компенсируя расходимости классического периода колебаний при энергии, равной максимуму потенциала, а во-вторых, в случае скачкообразного поведения склонов барьера. Обычно же, вне критического диапазона, в условиях глубокого туннелирования

фазы вообще не зависят от энергии и не дают вкладов в (2.8). Поправочные члены $O(\hbar^2)$ обозначим $\Delta\tau$ и приведем в явном виде:

$$\Delta\tau = \frac{5\hbar^2}{12m} \frac{d^4}{dE^4} \int \left(\frac{dU}{dx}\right)^2 p dx - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^3}{dE^3} \int \frac{d^2U}{dx^2} p dx + O(\hbar^6), \quad (2.9)$$

где m – масса частицы, движущейся в потенциальном поле $U(x)$, а $p = \sqrt{2m(E-U)}$ – ее импульс (индексы ямок не указываем). Заметим, что в случае плавных потенциалов члены в формуле (2.9) можно преобразовать к единому вкладу, а поправка $O(\hbar^4)$ фактически вычислена в [5]. Аналогичные квантовые поправки второго квазиклассического приближения получаются и в экспоненте у коэффициента прозрачности T плавного слабопропускаемого барьера.

Таким образом, именно формула (2.7) и обобщает результат (2.2) на несимметричный случай и переходит в (2.2) в случае симметрии, когда фаза $\varphi_{21} = \frac{\pi}{2}$ (см. [5]) и $\tau_1 = \tau_2 = \tau$.

Далее переходим к подробному изучению туннельного расщепления энергии для конкретных потенциалов с численными оценками. Вначале будут рассмотрены некоторые симметричные модели потенциальных полей. Напомним, что нашей задачей является исследование тонкого квантового эффекта расщепления уровней энергии в условиях двухъямных потенциалов. Описать подобные явления помогают

аналитические исследования с помощью соотношений, полученных одним из авторов данной книги в работе [5] на основе квазиклассических методов (здесь оказывается возможным подключение и второго квазиклассического приближения) в сочетании с точными решениями в окрестности особенностей потенциала, а также численные и графические методы. Так, среднее положение расщепляемых уровней энергии E_n определяется правилами квантования вида

$$\begin{aligned} \int k dx + \frac{5\hbar^2}{24m} \frac{d^3}{dE^3} \int \left(\frac{dU}{dx} \right)^2 k dx - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{d^2}{dE^2} \int \frac{d^2 U}{dx^2} k dx + O(\hbar^4) = \\ = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) + \alpha_1 + \frac{1}{2} \varphi_{22} - \frac{1}{2} \varphi_{21}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (2.10) \\ k = \sqrt{2m(E - U)/\hbar^2}, \end{aligned}$$

где интегрирование ведется между классическими точками поворота отдельной ямки, граничная фаза α учитывает поведение потенциала $U(x)$ вблизи внебарьерной точки поворота, а фазовые величины φ_{21} и φ_{22} определяются структурой барьера (в случае симметричного барьера $\varphi_{21} = \frac{\pi}{2}$).

Главный же результат – величина расщепления ΔE энергетических уровней – описывается выведенной универсальной формулой (2.2), в которой T есть коэффициент прозрачности барьера (если \sqrt{T} не очень мал, то его следует

заменить на $\arcsin(\sqrt{T})$), а величина τ является квантовым обобщением [5] классического периода колебаний в отдельной яме:

$$\tau = 2\hbar \frac{d}{dE} \left(\int k dx + \frac{5\hbar^2}{24m} \frac{d^3}{dE^3} \int \left(\frac{dU}{dx} \right)^2 k dx - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{d^2}{dE^2} \int \frac{d^2 U}{dx^2} k dx - \alpha \frac{1}{2} \varphi_{22} + \frac{1}{2} \varphi_{21} \right). \quad (2.11)$$

2.2. Расщепление в симметричных случаях

*– Так скорее же приступайте! – взмолилась Элен.
Жюль Верн*

Прямоугольный потенциал. Рассмотрим конкретных случаев начинаем с прямоугольной модели потенциала, изображенной на рис. 31-1. Мы вновь будем использовать безразмерные величины: в качестве единицы длины выбирается некоторое расстояние L , а энергетические характеристики будут измеряться в единицах $\hbar^2 / 2mL^2$.

В полученной общей формуле для расщепления уровней энергии (2) коэффициент прозрачности прямоугольного барьера высотой U_0 и шириной L_2 известен [1]:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \operatorname{sh}^2(\sqrt{U_0 - E} L_2)} \quad \text{при } E < U_0.$$

В интересующем нас случае слабой прозрачности барьера, т. е. при $\sqrt{U_0 - E} L_2 \gg 1$,

$$T = 16 \frac{E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp(-2\sqrt{U_0 - E}L_2). \quad (2.12)$$

Теперь обратимся к формуле для обобщенного периода колебаний (2.11). Здесь для непроницаемой границы [5] фаза $\alpha = \frac{\pi}{2}$, а несложный расчет для фазовой характеристики прямоугольного барьера дает следующее выражение:

$$\varphi_{22} = \operatorname{arctg} \left[\frac{U_0 - 2E}{2\sqrt{E(U_0 - E)}} \operatorname{th}(\sqrt{U_0 - E}L_2) \right],$$

в котором гиперболический тангенс можно для рассматриваемых русловий заменить единицей, так что получаем

$$\varphi_{22} = \frac{\pi}{2} - 2\operatorname{arctg} \frac{\sqrt{E}}{\sqrt{U_0 - E}}.$$

Подставляя эти выражения в (2.11), приходим к компактной формуле для обобщенного периода колебаний в отдельной ямке шириной L_1

$$\tau = \frac{\sqrt{E(U_0 - E)}}{\sqrt{U_0 - E}L_1 + 1} \quad (2.13)$$

и в соответствии с (4) и (2) к окончательному ответу для

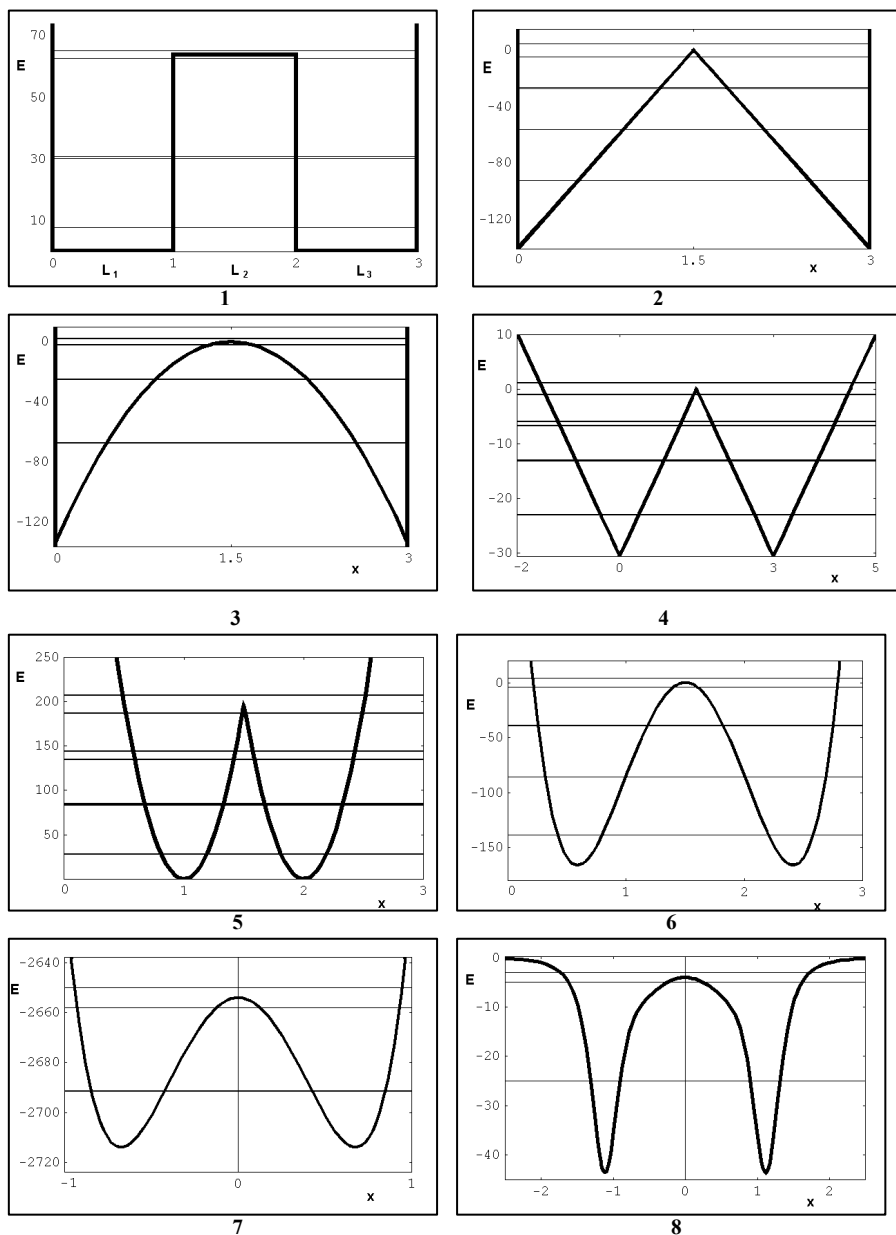


Рис. 31. Туннельное расщепление энергии в симметричных двухъямных потенциалах с критической ситуацией.

энергетических щелей

$$\Delta E_n = 8 \frac{E_n(U_0 - E_n)}{U_0} \frac{\exp(-\sqrt{U_0 - E_n} L_2)}{\sqrt{U_0 - E_n} L_1 + 1}, \quad (2.14)$$

где поправка в знаменателе в виде единицы существенно увеличивает точность, а средние положения расщепляемых уровней энергии E_n в соответствии с (2.10) удовлетворяют уравнению

$$\sqrt{E_n} L_1 = \pi(n+1) - \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{E_n}{U_0 - E_n}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.15)$$

Здесь при $U_0 \rightarrow \infty$ получаем энергетический спектр бесконечной прямоугольной ямы, а член с арктангенсом учитывает влияние конечности барьера – сдвиг уровней энергии по сравнению с изолированной ямой.

Далее перейдем к оценке эффективности выведенных формул на основе точных результатов для рассматриваемого прямоугольного потенциала. Несложный расчет приводит к следующим точным формулам для уровней энергии: в нечетных стационарных состояниях

$$\operatorname{tg}(kL_1) = -\frac{k}{\sqrt{U_0 - E}} \operatorname{th}(\sqrt{U_0 - E} L_2 / 2),$$

а в четных –

$$\operatorname{tg}(kL_1) = -\frac{k}{\sqrt{U_0 - E}} \operatorname{cth}(\sqrt{U_0 - E} L_2 / 2), \quad (2.16)$$

где волновое число $k = \sqrt{E}$.

Выберем в качестве типичного примера потенциал со следующими значениями параметров: $U_0 = 63,9714$ и $L_1 = L_2 = 1$. Тогда формула (2.14) в сопоставлении с численными расчетами энергий из точных уравнений (2.16) дает для энергетических щелей такие результаты: точное значение щели $\Delta E_0 = 0,00356026$ вычисляется по формуле (2.14) с относительной ошибкой $+2 \cdot 10^{-6} \%$, а то же для $\Delta E_1 = 0,0577064$ – с относительной ошибкой $-1 \cdot 10^{-3} \%$.

Добавим, что для следующей пары уровней, попадающей как раз на максимум барьера U_0 (см. рис.31-1), несложное аккуратное вычисление энергетической щели на основе общей формулы (2.2) дает при больших $U_0 \gg 1$ в первом приближении

результат
$$\tilde{\Delta E}_3 \approx \frac{12}{(3L_1 + 2L_2)L_2} \left(1 - \frac{1}{(3L_1 + 2L_2)L_2} \cdot \frac{1}{U_0} \right). \quad \text{В}$$

частности, для выбранных в нашем примере параметров потенциала $\tilde{\Delta E}_3 \approx 2,39250$, что очень близко к точному значению $\Delta E_3 = 2,39995$.

Линейный потенциал. Следующая модель с непроницаемыми границами построена из линейных участков в виде барьера с изломом (рис. 31-2).

Оценку точности расчета энергетических щелей рассмотрим на конкретном примере потенциала

$$U(x) = -a \left| x - 3/2 \right|, 0 < x < 3. \quad (2.17)$$

При этом в подбарьерном диапазоне энергий для пар расщепляемых уровней в общей формуле (2.2) для коэффициента прозрачности барьера можно использовать стандартное квазиклассическое выражение в режиме глубокого туннелирования

$$T = \exp(-2s), \quad (2.18)$$

где $s = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U(x) - E} dx$, а x_1 и x_2 являются прибарьерными

точками поворота. В этом же приближении для периода колебаний в одной из ям имеем обычный классический

результат $\tau = \int_0^{x_1} \frac{1}{\sqrt{E - U(x)}} dx$. Положение же средних значений

энергии расщепляемых пар задается правилами квантования (2.10), в которых барьерная фаза ϕ_{22} для режима глубокого туннелирования равна нулю [5], так что

$$\int_0^{x_1} \sqrt{E - U(x)} dx = \pi(n + 3/4), \quad n = 0, 1, \dots$$

В качестве конкретного примера рассмотрим случай с $a = 93,9808$, когда в режиме туннелирования оказываются три пары уровней (рис.31-2). Задача о стационарных состояниях в такой модели допускает точное решение на основе функций

Эйри и их производных: $Ai(z)$, $Bi(z)$, $Ai'(z)$ и $Bi'(z)$. В частности, уровни энергии E четных состояний определяются из условия обращения в ноль волновой функции при $x = 0$ и ее производной при $x = 3/2$, что приводит к уравнению

$$Bi\left(-\frac{E+3/2 \cdot a}{a^{2/3}}\right) * Ai'\left(-\frac{E}{a^{2/3}}\right) = Ai\left(-\frac{E+3/2 \cdot a}{a^{2/3}}\right) * Bi'\left(-\frac{E}{a^{2/3}}\right),$$

а для нечетных – из условия обращения в ноль волновой функции при $x = 0$ и $x = 3/2$ имеем уравнение

$$Bi\left(-\frac{E+3/2 \cdot a}{a^{2/3}}\right) * Ai\left(-\frac{E}{a^{2/3}}\right) = Ai\left(-\frac{E+3/2 \cdot a}{a^{2/3}}\right) * Bi\left(-\frac{E}{a^{2/3}}\right).$$

Это дает возможность численного расчета уровней энергии и соответствующих щелей с любой точностью, что и позволяет оценивать эффективность используемых приближенных расчетов.

Результаты первого квазиклассического приближения для щелей сводятся к следующему:

$$\Delta E_0^{(1)} = 0,0000403436 \quad \text{при относительной ошибке } -7 \%;$$

$$\Delta E_1^{(1)} = 0,0243506 \quad \text{при относительной ошибке } -3 \%;$$

$$\Delta E_2^{(1)} = 1,21228 \quad \text{при относительной ошибке } -3 \%.$$

Особый интерес представляют уточнения используемых формул в виде поправок второго квазиклассического приближения, причем как в правилах квантования энергии (2.10)

и обобщенном периоде колебаний (2.11), так и в подбарьерном туннельном интеграле s в (2.18):

$$s = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U(x) - E} dx + \frac{5}{12} \frac{d^3}{dE^3} \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{dU}{dx} \right)^2 \sqrt{U(x) - E} dx - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dE^2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{d^2 U}{dx^2} \sqrt{U(x) - E} dx. \quad (2.19)$$

Результаты второго квазиклассического приближения для щелей оказываются на порядок более точными:

$$\Delta E_0^{(2)} = 0,0000430138 \quad \text{при относительной ошибке } -0,2 \%;$$

$$\Delta E_1^{(2)} = 0,0250017 \quad \text{при относительной ошибке } -0,2 \%;$$

$$\Delta E_2^{(2)} = 1,24613 \quad \text{при относительной ошибке } -0,6 \%.$$

Особенность третьей пары уровней состоит в том, что они находятся на границе между областью глубокого туннелирования и критическим диапазоном энергии вблизи максимума барьера, где требуется особый расчет [5], который продемонстрируем на следующей модели.

Квадратичный потенциал. Эта модель с непроницаемыми границами построена на основе параболического барьера (рис. 31-3): $U(x) = -a(x - 3/2)^2, 0 < x < 3.$ (2.20)

Все сказанное о приближенных расчетах энергетических щелей в предыдущем случае относится и к этой модели, а точное решение получается на основе функций параболического цилиндра с соответствующими граничными условиями. Не станем приводить деталей всех расчетов, а отметим в случае

$a = 60,62$ результаты первого квазиклассического приближения: относительная ошибка для щели ΔE_0 составляет -7 %, а для ΔE_1 она равна +0,5 %, тогда как во втором квазиклассическом приближении ошибки равны соответственно -0,2 % и +0,03 %.

Добавим, что значение параметра $a = 60,62$ выбрано для того, чтобы средняя энергия третьей пары уровней энергии совпала как раз с максимумом барьера, где проявляются новые закономерности, присущие критическому диапазону энергий. Здесь расчет классического периода колебаний приводит к логарифмической расходимости по энергии (она отсчитывается от максимума барьера), которая компенсируется поправочным членом за счет производной барьерной фазы φ_{22} , также имеющей соответствующую расходимость. В результате получается конечная величина обобщенного периода:

$$\tau_0 = \frac{1}{\sqrt{a}} \left(\frac{1}{4} \ln a + \ln 3 + \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{2} C \right), \quad (2.21)$$

где постоянная Эйлера $C = 0,577216$. Кроме того, в формуле (2.2) коэффициент прозрачности квадратичного барьера при $E = 0$ равен $T = 1/2$, т. е. он не мал, так что требуется уточнение формулы (2.2), куда в таком случае входит, как уже отмечалось, не \sqrt{T} , а $\arcsin(\sqrt{T})$. В результате для значения параметра $a = 60,62$ получаем энергетическую щель $\Delta E_2 = 4,43$, что оказывается очень близким к точному значению $\Delta E_2 = 4,47$.

Относительная ошибка составляет -1 %. Подобное значение ошибки сохраняется и при других значениях параметра потенциала a , приводящих к аналогичной критической ситуации расположения энергетической щели одной из пар уровней энергии.

Преыдушие модели с непроницаемыми границами выбраны с одинаковым фиксированным интервалом $0 < x < 3$, чтобы не загромождать их обилием изменяющихся величин, оставив лишь один параметр потенциала.

Двойной линейный потенциал. Эта модель (рис. 31-4)

$$U(x) = a \left\| \left| x - \frac{3}{2} \right| - \frac{3}{2} \right| - \frac{3}{2} a \quad (2.22)$$

во многом близка к линейному потенциалу с непроницаемой границей. Особенностью является расчет четных уровней энергии во втором квазиклассическом приближении, когда нужно корректно учитывать изломный характер потенциальных ям. В остальном точность расчета повторяет описанную в первой линейной модели, так что не станем злоупотреблять местом в книге, ограничившись сказанным.

Двойной квадратичный потенциал. Особенностью данной модели (рис. 31-5)

$$U(x) = a \left(\left| x - \frac{3}{2} \right| - \frac{1}{2} \right)^2 \quad (2.23)$$

является отсутствие поправок квазиклассического приближения для уровней энергии и для независящего от энергии периода колебаний, так что главной заботой является правильный учет коэффициента прозрачности для изломного барьера. Все сказанное относительно точности расчетов щелей для предыдущих моделей остается в силе и для данного случая.

Квадратично-четверной потенциал. В отличие от предыдущих моделей, данная (рис. 31-6) не допускает точного аналитического решения для стационарных состояний, так что оценку точности применяемых формул для энергетических щелей проведем численными методами с помощью метода усеченной матрицы соответствующего гамильтониана в представлении гармонического осциллятора. Рассмотрим конкретный пример такого потенциала

$$U(x) = a_4(x - 3/2)^4 - a_2(x - 3/2)^2 \quad (2.24)$$

с параметрами $a_4 = 240,858$ и $a_2 = 400$. При этом для щелей численный расчет дает следующие значения:

$$\Delta E_0 = 0,0000916114; \quad \Delta E_1 = 0,0127416; \quad \Delta E_2 = 0,620245 \quad .$$

Относительные ошибки первого квазиклассического приближения составляют -8% , -3% , -1% , а учет поправок

второго квазиклассического приближения доводит ошибки до значений +1,6%, +0,5%, +0,5%. Расчет, подобный используемому при выводе формулы (2.21), для критического расположения уровней с $\Delta E_3 = 8,46080$ дает относительную ошибку -2 %.

Гиперболический потенциал. Он построен на основе гиперболических функций (рис. 31-7):

$$U(x) = \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2(x) - B\left(S + \frac{1}{2}\right) \operatorname{ch}(x). \quad (2.25)$$

где S принимает целые и полуцелые неотрицательные значения, а величина $B > 0$ изменяется непрерывно. Эта модель тесно связана с так называемыми спиновыми системами [6, 7], а именно: спиновый гамильтониан $\hat{H} = -\hat{S}_z^2 - B\hat{S}_x$, построенный из операторов проекций спина \hat{S}_k и описывающий легкоосный анизотропный парамагнетик со спином S в поперечном магнитном поле B , имеет энергетический спектр, совпадающий с $2S + 1$ нижними уровнями энергии в случае потенциала (2.25). Это позволяет находить уровни энергии гиперболического потенциала (2.25) с помощью уравнений для собственных значений спинового гамильтониана.

В качестве конкретных значений параметров гиперболического потенциала выберем $S = 40$ и $B = 65,53$. При

этом в подбарьерной области оказывается одна пара уровней энергии со щелью $\Delta E_0 = 0,28382$. Применение формулы (2.2) дает в первом приближении оценку с точностью – 8 %, а уточненное приближение увеличивает точность: ошибка равна +1 %. Кроме того, вторая пара уровней попадает в критический диапазон и обладает щелью $\Delta E_1 = 7,864$, расчет которой, подобно квадратичной модели, позволяет устранить расходимости и обеспечить точность с относительной ошибкой - 2%.

Солитонный потенциал. Он соответствует некоторому 4-солитонному решению уравнения Кортевега-де Фриза [6] и имеет 4 связанных стационарных состояния с уровнями энергии $E_n < 0$, которые можно задавать произвольно (детальнее такие потенциальные поля будут рассмотрены в четвертом разделе данной книги).

В качестве конкретного примера (см. рис. 31-8) выбираем следующие значения энергий:

$E_0 = -25$; $E_1 = -24,99$; $E_2 = -5$; $E_3 = -3,008$. При этом $(E_3 + E_2)/2 = U(0)$, так что для второй пары уровней энергии возникает критическая ситуация, а энергетические щели равны $\Delta E_0 = 0,01$; $\Delta E_1 = 1,992$. С помощью формулы (2.2) эти величины удастся рассчитать с такими относительными

ошибками: в первом приближении для ΔE_0 получаем +11%, во втором приближении +3%, а в критической ситуации, требующей уже использованного в других моделях специального приема вычислений с компенсацией расходимости, для ΔE_1 удается достичь точности с относительной ошибкой +1%.

Итак, во всех случаях результаты расчета энергетических щелей с помощью формулы (2.2) дают стабильно высокую точность: относительная ошибка составляет для грубого квазиклассического приближения несколько процентов, тогда как уточнение за счет поправок второго квазиклассического приближения (как для обобщенного периода, так и для коэффициента прозрачности) позволяет существенно уменьшить относительную ошибку (обычно на один или два порядка).

Каждая из рассмотренных моделей обладает ярким своеобразием, несмотря на некоторую общность форм (в запасе имеется еще ряд интересных потенциалов).

Отметим во всех рассмотренных моделях наличие особого критического диапазона энергий вблизи вершины барьера, где происходит переход от парного расположения уровней энергии со щелью к отдельным уровням. Здесь положение уровней определяется как туннелированием, так и надбарьерным

отражением, а величина щелей существенно зависит от характера вершины барьера (скачок, излом, простой максимум, четверной максимум и т. д.). Кроме того, в этом диапазоне энергий имеются интересные особенности поведения волновых функций стационарных состояний.

Добавим, что численные величины, фактически рассчитанные с большим количеством верных знаков, приводятся с округлением. Дополнительным контролем всех численных результатов служило решение уравнения Шредингера для стационарных состояний в соответствующих потенциальных полях баллистическим методом в сочетании с дихотомией.

О разных подходах к исследованию туннельного расщепления энергии и соответствующей литературе см. в [7].

Рассмотренные симметричные модели допускают простые деформации, что послужит объектом изучения туннельного расщепления в несимметричных ситуациях.

2.3. Расщепление в несимметричных случаях

*– Продолжайте, – попросил Перри Мейсон.
Э.С.Гарднер*

Среди изображенных на рис.30 несимметричных двухъямных потенциальных полей выберем лишь некоторые для подробного расчета. Заметим, что среди предложенных

картинок нет примера солитонного происхождения. У солитонных потенциалов фиксированы энергетические щели при любых деформациях потенциала, так что нельзя проиллюстрировать возникающий эффект «минимальной щели» при туннельном расщеплении.

В качестве первого примера рассмотрим несимметричный смешанный степенной потенциал $u(z) = a_4 z^4 + a_3 z^3 - a_2 z^2$ (рис.30-k) при значениях коэффициентов $a_4 = 1$ и $a_3 = 1/2$, тогда как a_2 будет использован для перестройки потенциала с демонстрацией особенности туннельного расщепления. Вычисляем уровни энергии с большой точностью методом диагонализации усеченного гамильтониана в представлении гармонического осциллятора, что особенно удобно для потенциалов, построенных из целых степеней координат.

По мере возрастания a_2 от нулевого значения в правой ямке возникает локализованное «собственное» связанное состояние и уровень энергии, с которым будет происходить взаимодействие уровней с преимущественной локализацией в левой ямке. В результате, при значении $a_2 = 7.938$ получаем эффект отталкивания уровней с минимальной туннельной щелью $e_2 - e_1 = 0.0135949$ при средней энергии $(e_2 + e_1)/2 = -8.659522$. Вычисление по формуле (2.7) уже в первом квазиклассическом приближении дает значение $\Delta e^{(quasi)} = 0.0128569$ с относительной ошибкой $\delta = 5\%$.

Второй пример – кусочно-квадратичный несимметричный потенциал (рис.30-j) $u(z) = (z + z_{01})^2 \theta(-z) + a(z - z_{02})^2 \theta(z)$, где

параметры связаны соотношением $a = z_{01}^2 / z_{02}^2$, обеспечивающим непрерывность потенциала в начале координат. Фиксируем $z_{01} = 4$ и изменяем z_{02} . Вычисляем уровни энергии на основе точного решения задачи с помощью функций параболического цилиндра. Следим за перестройкой энергетического спектра с минимизацией расстояния между уровнями e_2 и e_1 . Это происходит при параметре $z_{02} = 1.33205$ и средней энергии $(e_2 + e_1) / 2 = 2.99999$, когда туннельная щель равна $e_2 - e_1 = 0.00153250$. Расчет по формуле (2.7) дает $\Delta e^{(quasi)} = 0.00142176$ с относительной ошибкой $\delta = 7\%$.

Третий пример – кусочно-квадратичный несимметричный потенциал (рис.30-й) $u(z) = (z + z_{01})^2 \theta(-z) + u_0 + (z - z_{02})^2 \theta(z)$, где параметры связаны соотношением $z_{02} = \sqrt{z_{01}^2 - u_0}$, обеспечивающим непрерывность потенциала в начале координат. Фиксируем $z_{01} = 3$ и изменяем u_0 . Вычисляем уровни энергии на основе точного решения задачи с помощью функций параболического цилиндра. Следим за перестройкой энергетического спектра с минимизацией расстояния между уровнями e_2 и e_1 . Это происходит при параметре $u_0 = -1.9999$ и средней энергии $(e_2 + e_1) / 2 = 0.999989$, когда туннельная щель равна $e_2 - e_1 = 0.00145370$. Расчет по формуле (2.7) дает $\Delta e^{(quasi)} = 0.00135523$ с относительной ошибкой $\delta = 7\%$.

Четвертый пример – спиновый несимметричный эффективный потенциал

$$u(z) = \frac{1}{4} B_x^2 \left[\operatorname{sh}(z) - \frac{B_z}{B_x} \right]^2 - B_x \left(S + \frac{1}{2} \right) \operatorname{ch}(z) .$$

Фиксируем $S = 1$ и $B_x = 0.025$, а изменяем B_z . Вычисляем уровни энергии на основе точного решения задачи (см. третий раздел книги). Следим за перестройкой энергетического спектра с минимизацией расстояния между уровнями e_2 и e_1 . Это происходит при параметре $B_z = -1$ и средней энергии $(e_2 + e_1)/2 = 0.00008$, когда туннельная щель равна $e_2 - e_1 = 0.03535$. Расчет по формуле (2.7) дает $\Delta e^{(quasi1)} = 0.04050$ с относительной ошибкой $\delta = -14\%$.

Пятый пример – квадратично-линейный несимметричный потенциал на интервале:

$$u(z) = 3(z + c/2)^2 \theta(-z) + (3/4c^2 - az) \theta(z), \quad -c/2 < z < c/2 .$$

Фиксируем $c = 4$ и изменяем a . Вычисляем уровни энергии на основе диагонализации усеченной матрицы гамильтониана в представлении бесконечно глубокой потенциальной ямы, т. е. для движения на данном интервале. В первом варианте следим за перестройкой энергетического спектра с минимизацией расстояния между уровнями e_2 и e_1 . Это происходит при параметре $a = 16.7907$ и средней энергии $(e_2 + e_1)/2 = 5.179661$, когда туннельная щель равна $e_2 - e_1 = 0.443697$. Расчет по формуле (2.7) дает $\Delta e^{(quasi1)} = 0.420435$ с относительной ошибкой $\delta = 5\%$. Во втором варианте наблюдаем за минимизацией расстояния между уровнями e_1 и e_0 , что происходит при

параметре $a = 16.7907$ и средней энергии $(e_2 + e_1)/2 = 5.179661$, когда туннельная щель равна $e_2 - e_1 = 0.443697$. Расчет по формуле (2.7) дает $\Delta e^{(quasi1)} = 0.420435$ с относительной ошибкой $\delta = 5\%$. Во втором варианте наблюдаем за минимизацией расстояния между уровнями e_1 и e_0 , что происходит при параметре $a = 8.13645$ и средней энергии $(e_1 + e_0)/2 = 5.181163$, когда туннельная щель равна $e_1 - e_0 = 0.187148$. Расчет по формуле (2.7) дает $\Delta e^{(quasi1)} = 0.179087$ с относительной ошибкой $\delta = 4\%$.

Приведем графическое изображение эффекта отталкивания «термов» квадратично-линейного потенциала, типичное для снятия вырождения в теории возмущений [1, 2].

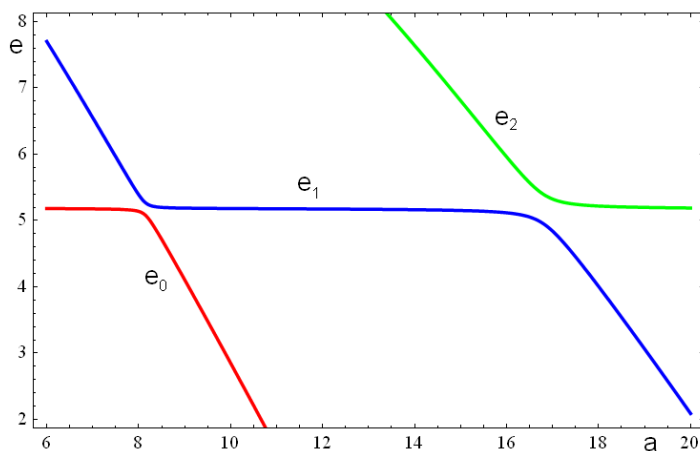


Рис.32. Представлено поведение уровней энергии основного и первых двух возбужденных состояний в зависимости от изменяемого параметра a .

Шестой пример – линейный несимметричный потенциал на интервале:

$$u(z) = 10z\theta(-z) - az\theta(z), \quad -c/2 < z < c/2.$$

Фиксируем $c = 4$ и изменяем a . Вычисляем уровни энергии на основе диагонализации усеченной матрицы гамильтониана в представлении бесконечно глубокой потенциальной ямы, т. е. для движения на данном интервале. Следим за перестройкой энергетического спектра с минимизацией расстояния между уровнями e_1 и e_0 . Это происходит при параметре $a = 10.00061$ и средней энергии $(e_1 + e_0)/2 = -9.150923869$, когда туннельная щель равна $e_1 - e_0 = 0.0764915$. Расчет по формуле (2.7) дает $\Delta e^{(quasil)} = 0.0757533$ с относительной ошибкой $\delta = 1\%$. Ситуация отражена на рис.33.

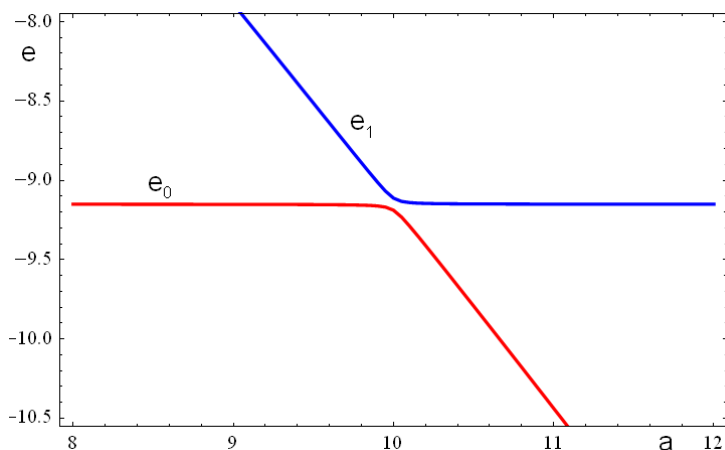


Рис.33. Поведение уровней энергии основного и первого возбужденного состояний в зависимости от параметра a .

Во всех примерах несимметричного туннелирования мы ограничились расчетами щелей в первом квазиклассическом приближении. Учет поправок второго приближения в квантовых периодах колебаний в ямках и в коэффициенте прозрачности обычно существенно повышает точность.

Примеры с прямоугольными потенциалами рис.29-а-б детально иллюстрируются анимационными программами. То же касается других примеров.

Отметим также одну важную особенность некоторых несимметричных потенциалов. В процессе их деформаций возникает симметричный профиль, туннельное расщепление уровней энергии в котором соответствует минимизации щелей соответствующего несимметричного профиля. Тем самым наблюдается еще одно явление – переход через симметричную стадию, щели в которой (одновременно все!) приобретают физический смысл минимальных щелей для несимметричных потенциалов.

В заключение отметим, что основное внимание во втором разделе нашей монографии уделено двум нетрадиционным для квантовой теории вопросам, которые для краткости мы называли «критической ситуацией» и «несимметричным туннелированием».

3. СПИНОВЫЕ ЭФФЕКТИВНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Это очень интересный пример саморасширения модели: модель оказывается справедливой в более широкой области параметров, чем та, для которой она создана.

М.И.Каганов

Эти слова замечательного теоретика в полной мере относятся к вопросу об эффективных потенциалах, полученных при изучении *спиновых систем*, но оказавшихся источником чрезвычайно интересного расширения множества точных решений уравнения Шредингера [6, 7].

В квантовой теории проблема точных решений уравнения Шредингера для стационарных состояний частицы в потенциальном поле постоянно привлекает внимание специалистов. Точно решаемые задачи служат основой иллюстраций теории стационарных состояний в квантовой механике [1]. Кроме того, они являются фундаментом для постановки новых задач, важны как база приближенных методов. Вообще, множество таких решений образует важный фонд квантовой механики, используемый как при изучении сложных явлений и при проверке новых теорий, так и имеющий самостоятельное значение. Совершенно естественно, что обращение к вопросам точных решений вызывает постоянный интерес. Можно выделить три периода интенсивного появления новых точно решаемых моделей.

В середине и конце 1920-х годов появились первые точно решаемые модели с простыми выражениями для потенциалов, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний (которые мы в данной монографии называем «стандартными») – гармонический осциллятор, кулоновское поле, потенциалы Морса, Эккарта, Пешля-Теллера, бесконечная прямоугольная яма, дельта-яма [1]. Затем наступило время различных обобщений, усложнений, композиций из разных моделей и т. п. Первый прорыв в область новых простых точно решаемых моделей обязан развитию теории солитонов. Связь одномерного стационарного уравнения Шредингера с нелинейным эволюционным уравнением Кортевега-де Фриза в теории солитонов приводит к появлению разнообразных классов особых локализованных моделей потенциальных полей, у которых имеются простые явные аналитические формулы для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний в квантовой механике. Существенно, что в отличие от других моделей с точными решениями в квантовой механике, для которых задается потенциал и решается уравнение Шредингера (задача о собственных значениях), в результате чего получаются уровни энергии, в моделях солитонного происхождения сразу же задаются уровни энергии и для каждого набора уровней существуют достаточно простые потенциалы с точными решениями. Другими словами, мы имеем дело с обратной

задачей — задаются уровни энергии (произвольно расположенные!) и для них строятся потенциалы. Еще одной важной особенностью потенциалов солитонной природы является то, что для каждого набора уровней энергии находится не один фиксированный профиль потенциала, а *бесконечное многопараметрическое семейство* потенциальных моделей [6].

Солитонные потенциалы будут рассмотрены в заключительном разделе этой книги.

3.1. Квазиточнорешаемые модели

— *А что значит это слово?* — спросила Мэри Грант.
Жюль Верн

Другое направление связано с обнаружением новых классов точных решений на основе недавно разработанных методов в квантовой теории спиновых систем [6, 7]. Так, при решении задачи о собственных значениях гамильтониана подобных спиновых систем оказывается, что энергетический спектр совпадает с некоторыми уровнями энергии частицы, движущейся в потенциальном поле определенного вида. В данном случае мы имеем дело с методом эффективного поля, приводящего к переходу от дискретного пространства к координатному. Для ассоциированной координатной системы это дает методы нахождения новых точных решений уравнения Шредингера с простыми явными аналитическими выражениями для потенциальных моделей, энергетических уровней и

волновых функций стационарных состояний. При этом особый интерес представляют такие случаи, когда спин не очень велик, так что характеристические уравнения в спиновом пространстве имеют простые явные решения. Число точных решений в рассматриваемых моделях оказывается конечным. Это свойство получило название "квазиточнорешаемости", а соответствующие принципиально новые объекты в квантовой механике получили название "квазиточнорешаемых" моделей.

Стационарные состояния с точными решениями спиновой природы относятся к нижней части энергетического спектра, начиная с основного уровня энергии. Такой подход при описании спиновых систем оказывается полезным при изучении физических свойств анизотропных парамагнетиков во внешнем магнитном поле (энергетического спектра, намагниченности, восприимчивости, спинового туннелирования) [6, 7].

Появление новых квантовых задач с точными решениями, источником которых явились системы спиновой природы, существенно обогатило множество моделей потенциалов с простыми явными аналитическими формулами для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний в квантовой механике. Специфика новых моделей состоит, прежде всего, в *разнообразии профилей* потенциалов, а их отличительная особенность – физический смысл уже при своем появлении, поскольку они явились не плодом математических

преобразований, а результатом исследования конкретных физических систем, в частности спиновых.

Очень важно иметь такой комплекс точных решений для методических иллюстраций, а также как базу проверки приближенных методов. Появляется наглядный способ демонстрации структуры спектра в случае потенциалов с экстремумами высокого порядка, попадания уровней в критический диапазон энергий вблизи максимумов потенциала, а также квантовых эффектов типа туннельного расщепления, формирования зонного спектра и т. п.

Обратимся к конкретным спиновым эффективным потенциалам. Метод нахождения точных решений разработан при исследовании спиновых систем [6, 7]. В соответствующем координатном пространстве спиновый гамильтониан становится дифференциальным оператором, в частности оператором Шредингера с некоторой эффективной потенциальной энергией.

Найденные потенциалы для простых спиновых систем либо имеют форму нелокализованных ям, либо оказываются периодическими. Во всех случаях имеются как симметричные, так и несимметричные разнообразные многопараметрические потенциальные модели.

Переходя к конкретным примерам, рассмотрим простейший случай системы, соответствующей модели парамагнетика с анизотропией типа "легкая ось" (легкоосного) во внешнем

магнитном поле, перпендикулярном оси анизотропии, и описываемой следующим гамильтонианом:

$$\hat{H} = -\hat{S}_z^2 - B\hat{S}_x, \quad (3.1)$$

где B – магнитное поле с точностью до постоянного множителя, \hat{S}_j – оператор j -проекции спина. Исследование энергетического спектра такой системы приводит к стандартному одномерному уравнению Шредингера для стационарных состояний

$$\psi'' + \left[E - \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2(x) + B\left(S + \frac{1}{2}\right) \operatorname{ch}(x) \right] \psi = 0, \quad (3.2)$$

где x – некоторая безразмерная координата, а решение $\psi(x)$, убывающее на бесконечности, является волновой функцией.

Другими словами, проблема собственных значений и собственных векторов спинового гамильтониана (3.1) приводит к координатной картине псевдочастицы, движущейся в эффективном потенциальном поле

$$U(x) = \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2(x) - B\left(S + \frac{1}{2}\right) \operatorname{ch}(x). \quad (3.3)$$

Полезно сравнить найденный точно решаемый потенциал со стандартными квантовомеханическими моделями. Потенциал (3.3) является симметричным, с довольно простыми выражениями для волновых функций и энергетических уровней, для которых соответствующие формулы приведены далее.

Потенциал (3.3) имеет зависимость от двух параметров: значение магнитного поля B изменяется непрерывным образом, а спиновый параметр S "пробегают" дискретный ряд целых и полуцелых значений. Если же отвлечься от конкретного физического смысла системы, благодаря которой появился потенциал (3.3), то, рассматривая формально S как непрерывным образом меняющуюся величину, получим модель с "внеспиновыми" значениями этого параметра.

В зависимости от указанных выше параметров форма потенциала существенно изменяется. Модель (3.3) при $B < B_0 = 2S + 1$ целесообразно записать следующим образом:

$$U(x) = -\frac{B_0^2 + B^2}{4} + \frac{B^2}{4} \left[ch(x) - \frac{B_0}{B} \right]^2. \quad (3.4)$$

Отсюда ясно, что при малых B потенциал (3.4) имеет вид двух достаточно удаленных ям, которые при увеличении B сближаются (рис.34-а). При $B = B_0$ эта модель принимает форму ямы с минимумом четвертого порядка (рис. 34-б):

$$U(x) = -\frac{B_0^2}{2} + B_0^2 \operatorname{sh}^4\left(\frac{x}{2}\right). \quad (3.5)$$

При $B > B_0$ имеем яму с одним минимумом (рис. 34-с).

Обнаружение такой двухъямной потенциальной модели, как и потенциала с четверным минимумом, представляет специальный интерес. Подробнее этот вопрос будет обсуждаться в следующем подразделе.

Таким образом, задача об уровнях энергии для спинового потенциала (3.3) сводится к нахождению собственных значений спинового гамильтониана, т. е. решению уравнения $\hat{H}\psi = E\psi$. В представлении, где диагональна проекция спина S_z , это уравнение сводится к системе линейных однородных уравнений, которая имеет ненулевое решение, если определитель системы равен нулю, что и является средством для нахождения уровней энергии. На основе таких правил построения характеристических уравнений и находятся уровни энергии для конкретных значений спина S . Затем осуществляется построение соответствующих волновых функций стационарных состояний (детали см. в [6]). В тривиальном для спинового гамильтониана (3.1) случае $S = 0$ имеется единственное собственное значение $E_0 = 0$, а соответствующая волновая функция основного состояния равна

$$\psi_0(x) = A_0 \exp\left[-\frac{B}{2}\text{ch}(x)\right]. \quad (3.6)$$

Это выражение фигурирует в качестве множителя во всех других формулах для волновых функций. Ему отвечает колоколообразный график, подобный "гауссиану" гармонического осциллятора (можно использовать такого типа пробную функцию в вариационном методе первого раздела нашей книги, что и предлагаем сделать читателю). Заметим, что

нормировочные коэффициенты A мы не будем приводить в явном виде, чтобы не загромождать главные результаты.

В случае $S = 1/2$ пара уровней энергии также непосредственно видна из структуры гамильтониана (3.1):

$$E_{0,1} = -\frac{1}{4} \mp \frac{1}{2}B. \quad (3.7)$$

Здесь и в дальнейшем первые индексы в обозначениях для уровней энергии отвечают верхним знакам в формулах.

Волновые функции имеют вид

$$\psi_1(x) = A_1 \exp\left[-\frac{B}{2}\text{ch}(x)\right] \text{sh}\left(\frac{x}{2}\right), \psi_0(x) = A_0 \exp\left[-\frac{B}{2}\text{ch}(x)\right] \text{ch}\left(\frac{x}{2}\right). \quad (3.8)$$

В случае $S = 1$ для четных состояний уровни энергии

$$E_{0,2} = -\frac{1}{2} \mp \sqrt{\frac{1}{4} + B^2}, \quad (3.9)$$

а для нечетного состояния

$$E_1 = -1. \quad (3.10)$$

Соответствующие волновые функции имеют вид

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 \exp\left[-\frac{B}{2}\text{ch}(x)\right] \text{sh}(x), \\ \psi_{0,2}(x) &= A_{0,2} \exp\left[-\frac{B}{2}\text{ch}(x)\right] \left[\text{ch}(x) - \frac{E_{0,2} + 1}{B} \right]. \end{aligned} \quad (3.11)$$

В случае $S = 3/2$ для четных состояний

$$E_{0,2} = -\frac{5}{4} - \frac{1}{2}B \mp \sqrt{1 - B + B^2}, \quad (3.12)$$

а для нечетных

$$E_{1,3} = -\frac{5}{4} + \frac{1}{2}B \mp \sqrt{1 + B + B^2}. \quad (3.13)$$

Волновые функции, а также примеры с другими значениями спина для краткости изложения приводить не станем (см. в [6]).

Перейдем теперь к примерам для несимметричного спинового потенциала. К такой модели приводит гамильтониан, описывающий легкоосный парамагнетик в наклонном по отношению к оси анизотропии магнитном поле

$$\hat{H} = -\hat{S}_z^2 - B_x \hat{S}_x - B_z \hat{S}_z.$$

Эффективный потенциал в этом случае имеет следующий вид:

$$U(x) = \frac{B_x^2}{4} \left[\text{sh}(x) - \frac{B_z}{B_x} \right]^2 - B_x \left(S + \frac{1}{2} \right) \text{ch}(x). \quad (3.14)$$

Он содержит три параметра: дискретный спиновый S и непрерывно изменяющиеся компоненты магнитного поля B_x и B_z . Этот потенциал может быть как несимметричным двухъямным (рис. 34-d), так и ямой с одним минимумом (рис.34-f), обладая также промежуточными формами с характерным "уступом" (рис.34-e), а также превращаясь в

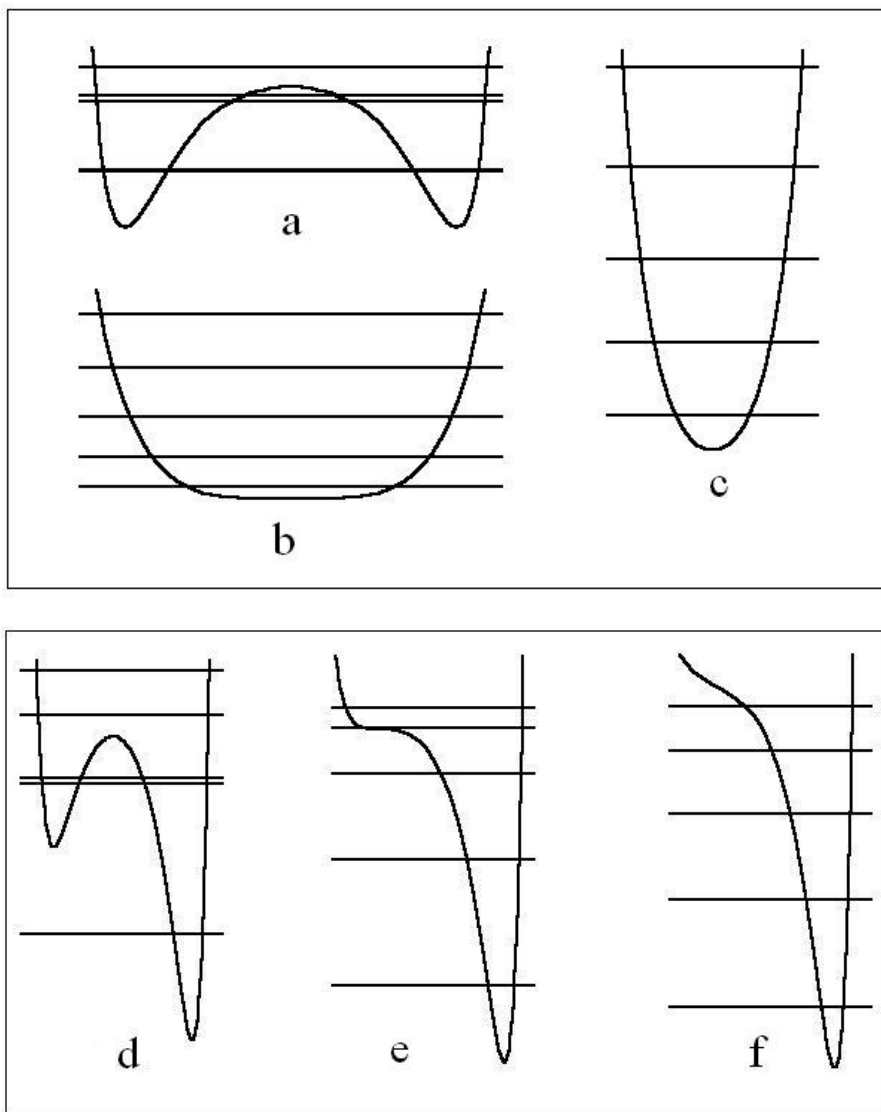


Рис. 34. Типичные профили спиновых эффективных потенциалов (симметричных и несимметричных).

упомянутую выше симметричную модель, в зависимости от соотношения между компонентами магнитного поля B_x и B_z .

Переходя к конкретным примерам, ограничимся только значениями спина $S=0$ и $S=1/2$. В случае $S=0$ спиновый уровень энергии $E=0$, а волновая функция основного состояния

$$\text{равна} \quad \psi_0(x) = A \exp \left[-\frac{B_x}{2} \operatorname{ch}(x) + \frac{B_z}{2} x \right]. \quad (3.15)$$

В случае $S=1/2$ уровни энергии равны

$$E_{0,1} = -\frac{1}{4} \mp \frac{1}{2} \sqrt{1 + B_x^2 + B_z^2}, \quad (3.16)$$

а волновые функции

$$\psi_{0,1}(x) = A \exp \left[-\frac{B_x}{2} \operatorname{ch}(x) + \frac{B_z}{2} x \right] \left[\exp\left(\frac{x}{2}\right) - \frac{B_z \mp \sqrt{B_x^2 + B_z^2}}{B_x} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) \right]. \quad (3.17)$$

На этом завершим примеры, отсылая читателя к подробному изложению теории и конкретных результатов для спиновых точных решений в [6].

3.2. 4-гиперболический осциллятор

*– Откуда ты, мой мальчик? – спросила Элен.
Жюль Верн*

Уже отмечалось, что для $B = B_0 = 2S + 1$ модель (3.4) принимает форму ямы с минимумом четвертого порядка (рис. 34-b), когда потенциал равен

$$U(x) = -\frac{1}{2}B_0^2 + B_0^2 \operatorname{sh}^4\left(\frac{x}{2}\right). \quad (3.18)$$

Удобно ввести новую координату $\xi = x/2$ и отсчитывать энергию от минимума четверного потенциала. Тогда в новых переменных соответствующее уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + [\varepsilon - U_1(\xi)]\psi = 0,$$

где

$$\varepsilon = 4E + 2B_0^2, \quad U_1(\xi) = Q \operatorname{sh}^4(\xi), \quad Q = 4B_0^2. \quad (3.19)$$

Таким образом, точные решения для потенциального поля с минимумом четвертого порядка (четверным) (3.19) существуют при значениях $Q = 4(2S+1)^2$, где $S = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$. При этом для не очень больших значений параметра S получаются простые явные формулы для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний. Опуская расчетные детали, приведем некоторые из них. Если $S = 0$, то для основного состояния

$$\varepsilon_0 = 2, \quad \psi_0(\xi) = A_0 \exp\left[-\frac{1}{2}\operatorname{ch}(2\xi)\right]. \quad (3.20)$$

Если $S = 1/2$, то к основному состоянию присоединяется первое возбужденное: $\varepsilon_1 = 11$, $\psi_1(\xi) = A_1 \exp[-\operatorname{ch}(2\xi)]\operatorname{sh}(\xi)$,

$$\varepsilon_0 = 3, \quad \psi_0(\xi) = A_0 \exp[-\operatorname{ch}(2\xi)]\operatorname{ch}(\xi). \quad (3.21)$$

Если $S = 1$, то в формулах появляются радикалы:

$$\varepsilon_1 = 14, \quad \psi_1(\xi) = A_1 \exp\left[-\frac{3}{2}\text{ch}(2\xi)\right] \text{sh}(2\xi), \quad (3.22)$$

$$\varepsilon_{0,2} = 16 \mp 2\sqrt{37}, \quad \psi_{0,2}(\xi) = A_{0,2} \exp\left[-\frac{3}{2}\text{ch}(2\xi)\right] [\text{ch}(2\xi) \pm \frac{\sqrt{37 \mp 1}}{6}].$$

Если $S = 3/2$, то для четырех состояний с низколежащими уровнями энергии получаются такие выражения:

$$\varepsilon_{1,3} = 35 \mp 4\sqrt{21}, \quad \psi_{1,3}(\xi) = A_{1,3} \exp[-2\text{ch}(2\xi)] [\text{sh}(3\xi) \pm \frac{\sqrt{21 \mp 3}}{2} \text{sh}(\xi)], \quad (3.23)$$

$$\varepsilon_{0,2} = 19 \mp 4\sqrt{13}, \quad \psi_{0,2}(\xi) = A_{0,2} \exp[-2\text{ch}(2\xi)] [\text{ch}(3\xi) \pm \frac{\sqrt{13 \pm 1}}{2} \text{ch}(\xi)].$$

Таким образом, возникает несколько парадоксальная ситуация, когда более простая модель 4-степенного четверного потенциала не имеет точных решений, а более сложная (и близкая к ней как качественно, так и количественно) 4-гиперболическая модель (3.19) таковыми обладает. Сопоставление уровней энергии этих двух моделей показывает, что они сближаются с увеличением параметра S в (3.19), а относительная ошибка оказывается порядка $S^{-2/3}$.

Такая связь между энергетическими спектрами двух потенциальных моделей может быть использована, в частности, для получения уровней энергии 4-гиперболического потенциала при больших значениях S , когда нет простых явных точных формул, а также для этой же модели при неспиновых значениях Q , т. е. когда $2S+1$ не есть целые числа.

Однако не менее важно, что тем самым мы получаем еще один способ нахождения уровней энергии четверного осциллятора с помощью модели (3.19). Так, если для $S=1$ относительная ошибка при расчете основного уровня энергии с помощью (3.22) составляет 10%, а для $S=7/2$ она равна 5%, то уже для $S=50$ получается лишь 1%. В более общем случае то же касается смешанного квадратично-четверного осциллятора и модели (3.14). Подробно эти вопросы изложены в работах, на которые имеются ссылки в [6].

3.3. Значение спиновых потенциалов

Лошадь и всадник представляли собой очень красивое зрелище.
Жюль Верн

В отличие от большинства стандартных моделей потенциалов, рассмотренные спиновые эффективные потенциалы имеют волновые функции стационарных состояний очень простого вида, выражаясь через экспоненты или гиперболические функции. Кроме найденных уровней энергии и волновых функций с точными выражениями в виде достаточно простых формул (относящихся к части энергетического спектра) имеется также бесконечное множество "надспиновых" состояний, для которых точные выражения отсутствуют (квазиточнорешаемость). Как уже подчеркивалось, используемое спин-координатное соответствие "расширяет" спиновую систему, "оснащая" ее такими объектами, как

непрерывное координатное пространство, а найденные точные решения уравнения Шредингера с простыми явными выражениями для потенциалов, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний существенно обогатили множество точно решаемых моделей в квантовой механике, которое образует незыблемое ценное достояние квантовой теории, ее "золотой" фонд.

Еще раз отметим, что и *спиновые системы*, и особенно *квазиточнорешаемые модели спинового происхождения* являются *новыми объектами* для квантовой механики.

Основные компьютерные исследования, связанные со спиновыми потенциалами, представлены в анимационных демонстрациях, стендах и в специальной презентации, прилагаемых к данной книге на компакт-диске.

Подчеркнем связь данного раздела с другими вопросами нашей книги.

Во-первых, спиновые потенциальные модели являются одним из обобщений степенных потенциальных полей, исследуемых в первом разделе.

Во-вторых, одна из спиновых моделей с минимумом четвертого порядка, как мы показали, тесно связана с четверным потенциалом.

В-третьих, они фигурируют в качестве конкретных примеров потенциалов, изучаемых в разделе о туннельном расщеплении энергии (как для симметричного случая с критической ситуацией, так и для несимметричного).

В-четвертых, спиновые потенциалы тесно связаны с потенциалами солитонного происхождения из заключительного раздела книги.

Наконец, на первой странице обложки нашей книги изображена конкретная спиновая симметричная модель потенциала с реальным расположением четырех уровней энергии и туннельным расщеплением, включая критическую ситуацию.

О литературе. Как уже отмечалось, подробное изложение основных результатов новых методов в теории спиновых систем содержится в монографии [6] и в большом обзоре [7]. Там же имеются многочисленные ссылки на работы этого направления и дальнейшие примеры спиновых систем и квазиточнорешаемых моделей.

4. СОЛИТОННЫЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ПОЛЯ

*Воображение, конечно, вольная птица.
Но мы редко замечаем, что вылетает
оно из клетки, которую всю жизнь
расширяет наше трезвое познание
действительности. В эту клетку
воображение постоянно возвращается
за питательным кормом.*

Д.С.Данин

Как уже отмечалось в предыдущем разделе нашей книги взаимосвязь одномерного стационарного уравнения Шредингера и нелинейного эволюционного уравнения Кортевега-де Фриза в теории солитонов приводит к появлению потенциальных полей, для которых имеются простые явные формулы для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний в квантовой механике [6].

4.1. Общие соотношения

*Беспредельный простор океана
открылся перед носом яхты.*

Жюль Верн

Кратко перечислим основные свойства потенциалов солитонной природы. Если задать N произвольно выбранных параметров $0 < \kappa_{N-1} < \kappa_{N-2} < \dots < \kappa_0$, то можно построить семейство пространственно локализованных потенциалов с помощью компактных формул

$$u(x) = -2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln[\det(F_{mn})];$$

$$F_{mn} = \delta_{mn} + 2 \frac{\sqrt{\kappa_m \kappa_n}}{\kappa_m + \kappa_n} \exp(\varphi_m + \varphi_n); \quad (4.1)$$

$$\varphi_n = \gamma_n + \Delta_n; \quad \gamma_n = \kappa_n x - 4\kappa_n^3 t + \delta_n; \quad m, n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (4.2)$$

где δ_{mn} – символ Кронекера. Нумерация отвечает принятой в квантовой механике для связанных стационарных состояний, а безразмерные величины типичны для теории солитонов. Величина t в потенциалах (4.1), которая имеет физический смысл времени для солитонов, тут является постоянным вспомогательным параметром, который будем называть "квазивременем", а "фазовые" величины Δ_n зависят от энергетических параметров κ_m :

$$\Delta_n = \frac{1}{2} \sum_{m=0, m \neq n}^{N-1} \left| \frac{\kappa_n + \kappa_m}{\kappa_n - \kappa_m} \right|, \quad N > 1; \quad \Delta_n = 0, \quad N = 1, \quad (4.3)$$

Особые фазовые добавки δ_n определяют симметрию моделей (4.1).

Для потенциальных энергий (4.1) стационарное уравнение Шредингера в координатном представлении

$$\frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + [E - u(x)] \psi_n = 0 \quad (4.4)$$

имеет связанные стационарные состояния с уровнями энергии $E_n = -\kappa_n^2$ и соответствующими нормированными волновыми функциями ψ_n , которые можно получить из неоднородной системы N линейных уравнений с формирующей матрицей F_{mn}

$$\text{из (4.1)} \quad \sum_{m=0}^{N-1} F_{nm} \psi_m = \sqrt{2\kappa_n} \exp(\varphi_n) . \quad (4.5)$$

Вещественные потенциалы (4.1) обращаются в нуль при $|x| \rightarrow \infty$ и имеют отрицательный знак $u(x) < 0 \quad \forall \quad x$, а их деформации при изменении квазивремени t происходят с

сохранением площади, так что $\int_{-\infty}^{+\infty} u(x) dx = -4 \sum_{n=0}^{N-1} \kappa_n$. При $t \rightarrow \pm\infty$

потенциал $u(x)$ состоит из N отдельных неодинаковых ям Эккарта, которые при $t=0$ объединяются в составную яму, имеющую разнообразные как симметричные (если все $\delta_n = 0$), так и несимметричные формы. В общем случае количество независимых параметров, которые определяют форму N -уровневых потенциалов, равно $2(N-1)$. Среди этих моделей есть класс таких, что при $t=0$ и всех $\delta_n = 0$ имеют форму ямы Эккарта $u(x) = -N(N-1)\kappa^2 / ch^2 \kappa x$ с уровнями энергии $E_n = -(N-n)^2 \kappa^2$.

Таким образом, в отличие от других случаев с точными решениями в квантовой механике, когда задается потенциал и решается уравнение Шредингера [1] (задача о собственных значениях), в результате чего получаются уровни энергии и

соответствующие волновые функции, в моделях солитонного происхождения *произвольно выбираются уровни энергии* и для них строятся достаточно простые потенциалы с точными решениями. Еще одной важной особенностью потенциалов солитонной природы является то, что для каждого набора уровней энергии находится не один фиксированный профиль потенциала, а *бесконечное многопараметрическое семейство потенциальных моделей*.

В области непрерывного спектра энергии $E > 0$ потенциалы (4.1) обладают свойством сверхпрозрачности: согласно стационарной теории рассеяния квантовые частицы проходят сквозь них безотражательно. Однако эти потенциалы не являются "невидимками", ибо в нестационарной теории будут наблюдаться локальные особенности движения волновых пакетов и интегральные эффекты типа временного сдвига по сравнению со свободным движением [8, 9].

В отличие от простых стандартных моделей потенциалов, у которых волновые функции стационарных состояний выражаются через специальные функции (кроме случаев дельта-потенциала и прямоугольной ямы), рассматриваемые солитонные потенциалы строятся из элементарных гиперболических функций, и волновые функции для них также состоят из гиперболических функций. Еще одно отличие заключается в том, что стандартные модели являются

однопрофильными и в лучшем случае однопараметрическими (не считая размерных коэффициентов), тогда как у солитонных потенциалов для каждого набора уровней энергии находится не один фиксированный профиль потенциала, а бесконечное многопараметрическое семейство потенциальных моделей.

Особое отличие от всех других моделей состоит в том, что можно задавать совершенно произвольно зависимость уровней энергии E_n связанных состояний от номера состояний n , разумеется, с учетом того, что обычно энергия отсчитывается от предельных значений потенциала $U(\pm\infty)$, так что в случае произвольного $E_n < 0$ энергетические параметры равны $\kappa_n = \sqrt{|E_n|}$, и на их основе строятся как потенциалы (с включением дополнительных параметров: квазивремени t и фазовых добавок δ_n), так и волновые функции стационарных состояний.

Постановка вопроса о точных решениях уравнения Шредингера солитонной природы в литературе по квантовой механике, за исключением [8, 9], по всей видимости, в этом аспекте еще не отмечалась.

4.2. Конкретные примеры

Путешественники с интересом осматривали долину, расстилавшуюся перед ними.

Жюль Верн

Перечислим некоторые конкретные примеры солитонных потенциальных полей. В случае $N=1$ форма модели (4.1) фиксирована – это одноуровневая яма Эккарта с $E_0 = -\kappa_0^2$ для которой всегда можно выбрать начало отсчета координаты x таким образом, чтобы $u(x) = -2\kappa_0^2 / ch^2 \kappa_0 x$. Тогда соответствующая волновая функция основного состояния согласно уравнению (4.5) равна

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\kappa_0}{2}} \frac{1}{ch \kappa_0 x}. \quad (4.6)$$

В случае $N=2$ модели (4.1) уже имеют достаточно разнообразные формы (с одним или двумя минимумами, включая минимум 4-го порядка), которые определяются двумя параметрами: квазивременем t и отношением энергетических величин κ_0 / κ_1 (фазовые добавки δ_0 и δ_1 можно сделать равными нулю выбором начала отсчета x и t). Соответственно, решая систему (4.5), приходим к формулам для волновых функций основного и первого возбужденного состояний

$$\psi_0(x) = \sqrt{2\kappa_0} \exp(\Delta) \frac{ch \gamma_1}{d_2}, \quad \psi_1(x) = -\sqrt{2\kappa_1} \exp(\Delta) \frac{sh \gamma_0}{d_2}. \quad (4.7)$$

Уровни энергии равны $E_0 = -\kappa_0^2$ и $E_1 = -\kappa_1^2$. Координата x входит в выражения для потенциала и волновых функций (4.7) через линейную зависимость от x величин γ_n в (4.2).

Если одно- и двухуровневые формы потенциалов (4.1) хорошо знакомы по соответствующим солитонным профилям, то этого нельзя сказать уже про трехуровневые модели, когда имеется четыре независимых параметра: отношения энергетических величин, например κ_1 / κ_2 и κ_0 / κ_2 , квазивремя t и одна из фазовых добавок, например δ_2 (две другие влияют только на начало отсчета x и t , так что их можно считать равными нулю). Если при этом $t=0$ и $\delta_2=0$, то имеем симметричные формы потенциалов (4.1), то есть четные функции $u(-x) = u(x)$, которые при $x=0$ равны $u(0) = -2(\kappa_0^2 - \kappa_1^2 + \kappa_2^2)$.

Исследование показывает, что при условии

$$\kappa_0^4 - 4(\kappa_1^2 - \kappa_2^2)\kappa_0^2 + (\kappa_1^2 - \kappa_2^2)(3\kappa_1^2 - \kappa_2^2) = 0 \quad \text{возникают}$$

экстремумы 4-го порядка. На плоскости $(\kappa_1^2 / \kappa_2^2, \kappa_0^2 / \kappa_2^2)$ это отвечает ветви гиперболы, часть которой принадлежит четверным минимумам (рис. 35-е), а другая часть – четверным максимумам (рис. 35-ф). На стыке минимумов и максимумов имеется минимум 6-го порядка (рис. 35-г) с любопытным симметричным расположением уровней энергии.

На рис. 35 приведены некоторые типичные симметричные формы потенциалов, которые отвечают различным соотношениям между энергетическими величинами κ_m : профиль "а" отвечает параметрам $\kappa_1 / \kappa_2 = 2$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 3$, профиль "b" – параметрам $\kappa_1 / \kappa_2 = 2.2$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 2.5$, профилю "с" соответствуют параметры $\kappa_1 / \kappa_2 = 1.1$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 2.4$, профилю "d" – параметры $\kappa_1 / \kappa_2 = 1.1$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 1.2$, профиль "е" возникает при $\kappa_1 / \kappa_2 = 2.1$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 3$, профиль "f" – при $\kappa_1 / \kappa_2 = 1.73$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 2$, профиль "g" появляется при значениях

$$\kappa_1 / \kappa_2 = \sqrt{2 + \sqrt{2}} \quad \text{и} \quad \kappa_0 / \kappa_2 = \sqrt{3 + 2\sqrt{2}} .$$

При $t \neq 0$ и(или) $\delta_2 \neq 0$ получаем несимметричные профили (некоторые из них представлены на рис. 36).

В случае $N = 4$, если $t = 0$ и все $\delta_n = 0$, потенциальные энергии (4.1) при $x = 0$ принимают значения $u(0) = -2(\kappa_0^2 - \kappa_1^2 + \kappa_2^2 - \kappa_3^2)$, а их экстремумам 4-го порядка в пространстве переменных $(\kappa_2^2 / \kappa_3^2, \kappa_1^2 / \kappa_3^2, \kappa_0^2 / \kappa_3^2)$ отвечает однополостный гиперболоид, внутри которого потенциал имеет максимумы, а снаружи – минимумы. На этой поверхности проходят также линии экстремумов 6-го порядка, пересечение которых дает точку минимума 8-го порядка, где потенциал оказывается с весьма уплощенным дном:

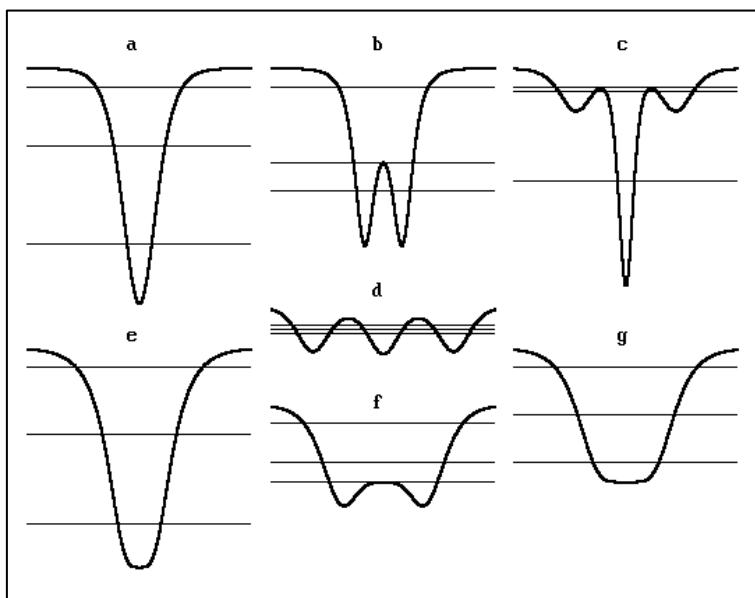


Рис.35. Некоторые симметричные трехуровневые солитонные потенциальные поля.

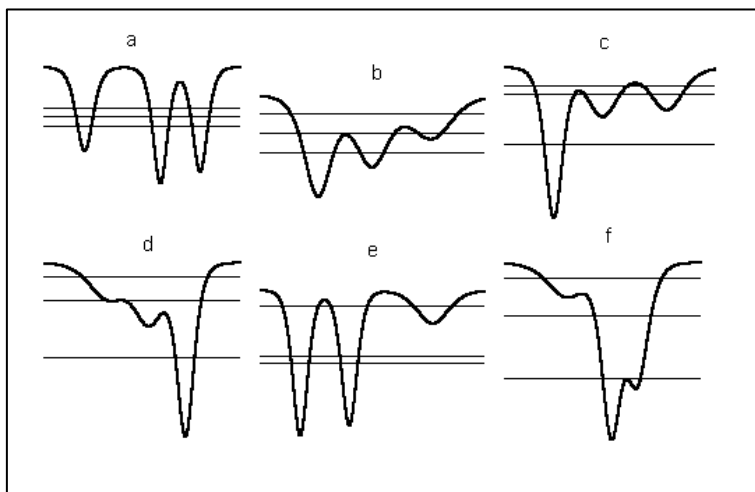


Рис.36. Некоторые несимметричные трехуровневые солитонные потенциальные поля.

$$u(x) = -2(3 + \sqrt{5})\kappa_3^2 + \frac{4}{315}(123 + 55\sqrt{5})\kappa_3^{10}x^8 + O(x^{10}),$$

при таких значениях энергетических параметров:

$$\kappa_2 / \kappa_3 = \sqrt{(5 + \sqrt{5}) / 2}; \quad \kappa_1 / \kappa_3 = \sqrt{(7 + 3\sqrt{5}) / 2};$$

$$\kappa_0 / \kappa_3 = \sqrt{5 + 2\sqrt{5}}.$$

Аналогичные особенности имеют и многоуровневые модели с $N > 4$.

Компьютерные методы исследования указанных потенциальных моделей подразумевают их графическое представление, количественные оценки различных приближений, детализацию сочетаний параметров, наблюдение за поведением соответствующих волновых функций и т. п.

Приведем еще пример компьютерного исследования влияния энергетических параметров. Так, на рис. 37 (с экрана дисплея) показана схема сканирования области параметров κ_1 / κ_2 и κ_0 / κ_2 при условии $t = 0, \delta_2 = 0$, на которой отмечены участки различных экстремумов симметричных потенциальных моделей.

В правом нижнем углу при этом появляется текущий профиль потенциала с расположением уровней энергии. Над ним, в маленьком окне, показаны конкретные значения параметров $\kappa_2, \kappa_1, \kappa_0$, а также изменяемый шаг $d\kappa$ передвигающегося указателя (крестик в круге). В левом

маленьком окне обозначены характерные линии и области: жирная кривая показывает минимумы 4-го порядка, тонкая – максимумы 4-го порядка, а на их пересечении имеем минимум 6-го порядка. Большие цифры показывают часть площади, где размещены: 1 – профили с одним, 2 – двумя и 3 – тремя минимумами.

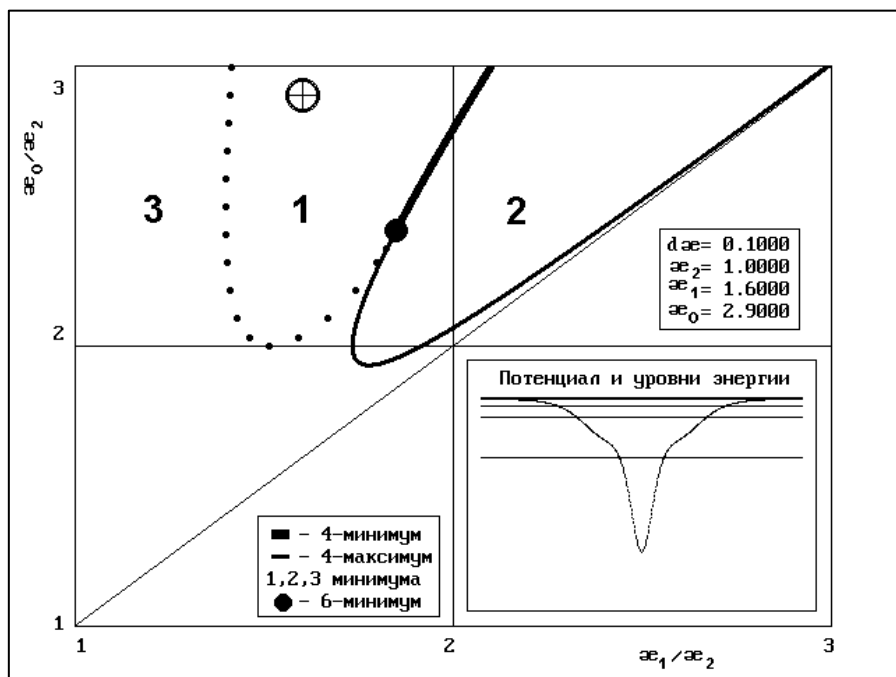


Рис.37. Изображение компьютерного экрана для изучения профилей трехуровневых солитонных потенциалов.

Для изучения потенциалов солитонного типа нами было проведено компьютерное моделирование влияния различных параметров на форму моделей (4.1). Аналитические результаты при этом проверяются и существенно дополняются в условиях компьютерной визуализации.

4.3. Обратная задача восстановления потенциала по виду энергетического спектра. Инвариантность спектра

*– Прежде всего, – предложил Гленарван, –
расчленим этот документ на три части.*

Жюль Верн

Основной материал нашей книги посвящен прямой задаче исследования квантовых систем: известно потенциальное поле, а ищутся уровни энергии и волновые функции стационарных состояний для проведения дальнейшей работы по изучению свойств данной системы. Обратная задача – известен энергетический спектр, а ищется потенциальное поле, а также волновые функции стационарных состояний. Для реализации такой обратной задачи имеются два подхода.

Первый подход связан с природой солитонных потенциалов. В исходных построениях этих потенциалов предполагается, что фактически задаются уровни энергии и на их основе строятся формулы для потенциала и волновых функций стационарных состояний. Это и есть решение указанной обратной задачи. Задаваемые уровни энергии могут

быть любыми, но есть ограничения: они должны быть отрицательными (что всегда можно сделать за счет выбора начала отсчета энергии), их число должно быть конечным (хотя и как угодно большим), среди задаваемых уровней не должно быть одинаковых, поскольку энергетический спектр в одномерном случае невырожден. При этом получается, во-первых, точное решение, а во-вторых, бесконечное многообразие потенциалов для каждого спектра энергии (один симметричный потенциал и множество несимметричных). Можно задавать формулу энергетического спектра либо единым выражением (например, $E_n = (n + 1/2)^{3/2}$, $n = 0, 1, 2, \dots$), либо отдельными уровнями энергии (например, спиновыми $E_0 = -1/4 - B/2$, $E_1 = -1/4 + B/2$ для $S = 1/2$ и конкретных B).

Второй подход связан с квазиклассическим правилом квантования энергии и решением задачи о восстановлении потенциала по зависимости периода классических колебаний от энергии (см. [10]). Здесь также получается одно симметричное решение и бесконечное число потенциалов несимметричных, но есть два ограничения. Во-первых, решение получается приближенным, поскольку опирается на первое квазиклассическое приближение. Во-вторых, годится не любой задаваемый закон энергетического спектра. При этом число

энергетических уровней не ограничено (нелокальные потенциалы – только дискретный спектр), а значит, с ростом энергии увеличивается эффективность аппроксимации (в силу квазиклассичности приближения).

Оба указанных подхода иллюстрирует наша специальная компьютерная разработка, в которой выбирается конкретный энергетический спектр из некоторого набора, и тут же появляется соответствующая картина симметричных потенциалов: солитонного (точное решение – сплошная линия), а также квазиклассического (приближенное решение) или спинowego (точное решение), прорисованных штриховой линией.

При этом оба подхода дают эффект инвариантности *всего* энергетического спектра при деформациях потенциалов (в солитонном случае – точная инвариантность, а в квазиклассическом – соответствующая приближенная).

Добавим о связи указанных подходов к построению множества потенциальных моделей из раздела о спинowych потенциалах, где специально подчеркивалось, что встречаются отдельные ситуации, когда спиновый спектр фиксирован, а ему соответствует бесконечное множество потенциалов. Это одноуровневые случаи $S = 0$; $E_0 = 0$ (симметричная и

несимметричная модели) и $S = 1$; $E_1 = -1$ (симметричная модель), а также случай $S = \frac{1}{2}$; $E_{0,1} = -\frac{1}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{1 + B_x^2 + B_z^2}$ двухуровневый (несимметричная модель при $B_x^2 + B_z^2 = \text{const}$).

Повторяем, что важен еще один аспект в подходах к обратной задаче — одновременно решается вопрос об *инвариантности* энергетического спектра (или его части) при деформации потенциала. В солитонном случае спектр энергии автоматически остается неизменным при деформациях получаемого потенциала за счет изменения фазовых параметров и квазивремени. В квазиклассическом — специальным преобразованием потенциала достигается неизменность классического периода колебаний, а вместе с ним и энергетического спектра. В спиновых эффективных потенциальных моделях встречаются особые случаи, когда остается неизменным только вся спиновая часть энергетического спектра или отдельные уровни.

В потенциальных моделях с *двумя* параметрами можно поставить задачу о постоянстве *одного* из уровней энергии при изменении потенциала за счет одного из параметров, когда второй соответствующим образом подстраивается и т. д. Конкретные ситуации иллюстрируются на несимметричных

кусочно-степенных потенциальных моделях – квадратичной и линейной.

Наконец, можно предложить еще один вид обратной задачи: задается волновая функция определенного типа и на ее основе строится потенциал и некоторый уровень энергии. Преимущество такого подхода – бесконечное многообразие потенциальных моделей (как отдельных, фиксированных, так и с изменяющимся профилем), недостаток – получается система только с одним фиксированным уровнем энергии (впрочем, это же является и достоинством, так как реализуется еще один способ получения систем с инвариантным энергетическим уровнем). Приведем пример подобных построений. Волновую функцию выбираем в виде $\psi(z) = C \text{Exp}[-f(z)]$, где произвольная функция $f(z) \rightarrow \infty$ при $|z| \rightarrow \infty$, а C – нормировочная постоянная. Такая функция не имеет узлов, следовательно, относится к основному стационарному состоянию. Тогда из уравнения Шредингера получаем при выборе отсчета энергии от $e_0 = 0$ для потенциала выражение

$$u(z) = \psi''(z) / \psi = [f'(z)]^2 - f''(z).$$

Конкретные примеры представлены в наших компьютерных разработках. Аналогичным образом строится множество потенциалов с фиксированным первым возбужденным уровнем

потенциалов с фиксированным первым возбужденным уровнем энергии при выборе соответствующей волновой функции с одним узлом: $\psi(z) = Cz \text{Exp}[-f(z)]$.

4.4. Аналогия между потенциальными полями спинового и солитонного происхождения

*Мейсон, Пол Дрейк и Делла Стрит
заглянули внутрь.*

Э.С.Гарднер

Между солитонными и рассмотренными в предыдущем разделе спиновыми моделями потенциальных полей имеется много общего. В обоих случаях имеется некоторое ассоциированное уравнение Шредингера, с помощью которого решаются главные задачи – проблема энергетического спектра в спиновых системах и задача Коши в теории солитонов для нелинейного эволюционного уравнения Кортевега-де Фриза. В обоих случаях исходные элементы – дискретные (спин и солитон), а им ставятся в соответствие непрерывные координатные представления с одномерными потенциальными полями и некоторым энергетическим соответствием. В спиновом случае имеем спиновый спектр и надспиновые уровни энергии для нелокализованных потенциалов, а в солитонном случае имеем у локализованных потенциалов дискретный солитонный спектр и непрерывный "надсолитонный" с полной прозрачностью. Еще один общий аспект – целочисленная аналогия: в спиновом случае основным параметром потенциальных моделей является целое число $2S+1$, тогда как

эквивалентным элементом в солитонном случае служит число солитонов N . И в том, и в другом случае имеются потенциалы и волновые функции стационарных состояний построенные из экспоненциальных (или гиперболических) функций. Общей спин-солитонной особенностью является четкое разбиение энергетического спектра на две части: в спиновых системах это выражается в квазиточнорешаемости, а в солитонных – в безотражательности.

Кроме того, в обоих случаях потенциальным моделям присущи разнообразие форм, наличие нескольких параметров, помимо отмеченных дискретных, появление аналогичных особых профилей потенциалов: с минимумом четвертого порядка, двухъямных с возможным попаданием уровней энергии в критический диапазон вблизи максимума разделяющего ямы барьера и т. п. И в том, и в другом случае наряду с симметричными моделями существуют разнообразные несимметричные.

Аналогия может прослеживаться во многих аспектах, среди которых важное место занимает ввод в обиход новых понятий (квазиточнорешаемость, ассоциированное уравнение Шредингера, спин-координатное соответствие, безотражательность). Далее, в обоих случаях открытие точных решений явилось побочным результатом основных исследований – разработки новых методов в теории спиновых и солитонных систем. Солитонный бум в значительной степени эксплуатировал квантовую теорию, но его достижения остались

в основном в трудах по солитонике и не перешли еще в монографии по квантовой механике и ее приложениям (см., однако, [8]). Та же ситуация сложилась и в отношении проблемы квазиточнорешаемых задач и новых подходов в теории спиновых систем, хотя здесь речь идет главным образом о связи между двумя разделами самой квантовой механики. В проблеме квазиточнорешаемых задач преобладают матфизика и чистая математика, как было и в теории солитонов.

Таким образом, между двумя совершенно различными системами, поставляющими в квантовую теорию модели с точными решениями, имеется целый ряд соответствий. Видимо, еще предстоит выяснить вопрос о том, является ли это чисто внешней аналогией, или за этим скрыто глубокое структурное сходство.

Кратко перечислим результаты конкретных компьютерных исследований систем с солитонными потенциалами.

Во-первых, построены и представлены графически симметричные трехсолитонные модели различных видов (рис.35). Во-вторых, то же сделано для несимметричных случаев (рис.36). В-третьих, создан специальный компьютерный стенд для изучения трехсолитонных симметричных потенциалов. Его изображение приведено на рис. 37. В-четвертых, разработана компьютерная программа построения солитонных потенциалов по заданным уровням энергии с получением соответствующих волновых функций стационарных состояний. В-пятых, на основе этой программы решается обратная задача воспроизведения

потенциальных полей по заданному закону расположения уровней энергии. В-шестых, созданы анимационные демонстрации солитонных потенциалов при случайном выборе уровней энергии (как для симметричных, так и для несимметричных случаев). В-седьмых, в разделе о туннельном расщеплении энергии использована модель солитонного потенциала для изучения специального случая с критической ситуацией расположения щели (рис.29-h).

Как уже отмечалось, солитонные потенциалы обладают, помимо дискретных уровней энергии, которым были посвящены наши исследования, непрерывным энергетическим спектром. Эта их особенность служит промежуточным звеном при переходе ко второй части нашей книги.

В завершение еще раз перечислим те явления, эффекты и свойства квантовых систем, которые исследовались в нашей книге.

Дискретность энергии, квантование энергии. Стационарность состояний, постоянство вероятностей физических величин. Нулевые колебания в основном стационарном состоянии. Проникновение в классически недостижимые области движения. Квазиклассичность поведения квантовых систем. Неопределенности координатно-импульсные. Туннельное расщепление уровней энергии. Критическая ситуация при расщеплении уровней энергии. Несимметричные

случаи при расщеплении энергии. Квазиточнорешаемость в спиновых системах. Деформации спиновых эффективных потенциалов. Внеспиновые и надспиновые состояния в спиновых потенциалах. Многопрофильность солитонных потенциалов. Безотражательность (сверхпрозрачность) солитонных потенциалов. Инвариантность энергетического спектра в солитонных потенциалах. Обратная задача воспроизведения потенциала по уровням энергии. Спин-солитонная аналогия.

Добавим, что мы ввели в круг исследуемых систем совершенно новые для квантовой механики объекты – спиновые и солитонные потенциалы.

На всех этапах исследований компьютерные и чисто аналитические расчеты *дополняли* друг друга: компьютерные методы позволили, в частности, контролировать аналитические расчеты как на основе аналитических же преобразований с помощью системы компьютерной математики Mathematica [11], так и в численном и графическом виде. При этом графическое изображение часто служило стимулом аналитических расчетов, являясь аналогом физического эксперимента. Кроме того, аналитические результаты существенно дополнялись в условиях *компьютерной визуализации*, обнаруживая новые особенности изучаемых объектов.

ПОСЛЕСЛОВИЕ

Я вижу, сколько еще мне осталось сказать, чтобы постичь подлинную причину данного явления, и потому предпочитаю услышать, что думаешь по этому поводу ты, проницательнейший из мужей, нежели утомлять тебя своими догадками.

И. Кеплер

Первая часть нашей монографии посвящена исследованиям квантовых явлений в системах, имеющих только связанные стационарные состояния. Системы с непрерывным и зонным энергетическим спектром должны послужить предметом исследования во второй части, а третью часть планируется посвятить нестационарным состояниям.

Еще и еще раз нужно отметить, что многие результаты представлены так, чтобы можно было с ними работать *интерактивным* образом с помощью авторских компьютерных разработок на прилагаемом к монографии компакт-диске, который является *неотъемлемой частью книги*.

Следует подчеркнуть один важный принципиальный момент. Читатель уже, вероятно, заметил, что некоторые вопросы в книге оставлены без ответа, что кое-что упомянуто, но не доведено до конца. Чаще всего это сделано умышленно. Авторская позиция такова: решение не должно быть исчерпывающим, темы не должны закрываться. Всегда должна оставаться перспектива продолжения. Решение одной проблемы должно *порождать новые направления* исследований. Читателю нужно оставить поле для самостоятельной деятельности.

Особый вопрос заключается в применении получаемых теоретических результатов к реальным физическим системам. Заметим, что современные нанотехнологии позволяют создавать условия, при которых системы с рассматриваемыми потенциальными моделями и чисто квантовыми явлениями могут в полной мере реализоваться на практике. Конкретные приложения, однако, выходят за рамки наших исследований.

Июнь 2012 года

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). - М.: Наука, 1989. - 768 с.
2. Давыдов А.С. Квантовая механика. - М.: Наука, 1973. - 704 с.
3. Ульянов В.В. Интегральные методы в квантовой механике. - Х.: Высш. шк., 1982. - 160 с.
4. Ульянов В.В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике. - Х.: Высш. шк., 1980. - 216 с.
5. Ульянов В.В. О квазиклассическом движении частиц в полях с особенностями. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2002. - 24 с.
6. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Новые квазиточнорешаемые модели в квантовой теории спиновых систем. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2005. - 124 с.
7. Ulyanov V.V, Zaslavskii O.B. New methods in the theory of quantum spin systems // Phys. Rep. - 1992. - V.216, N 4. - P. 179-251.
8. Ульянов В.В. Методы квантовой кинетики. - Х.: Высш.шк., 1987. - 144 с.
9. Ульянов В.В. Вступ до квантової кінетики. - Х.: ХНУ імені В.Н.Каразіна, 2004. - 164 с.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Классическая механика. - М.: Наука, 1988. - 216 с.
11. Дьяконов В.П. Mathematica 5/6/7. Полное руководство.- М.: ДМК Пресс, 2009. - 624 с.
12. Теория солитонов/Захаров В.Е., Манаков С.В., Новиков С.П., Питаевский Л.П. - М.: Наука, 1980. - 320 с.
13. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. - М.: Физматгиз, 1962. - 1100 с.
14. Справочник по специальным функциям. - М.: Наука, 1979. - 832 с.

ДОПОЛНЕНИЕ

К монографии прилагается компакт-диск, на котором содержатся: анимационные демонстрации, компьютерные стенды для наблюдения исследуемых квантовых систем в зависимости от изменяемых параметров, примеры компьютерных вычислений в системе Mathematica, презентации с различными рисунками и графиками, а также электронные версии некоторых авторских книг по квантовой теории (файлы формата pdf):

- A. Ульянов В.В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике. - Х.: Высш. шк., 1980. - 216 с.
- B. Ульянов В.В. Интегральные методы в квантовой механике. - Х.: Высш. шк., 1982. - 160 с.
- C. Ульянов В.В. Методы квантовой кинетики. - Х.: Высш.шк., 1987. - 144 с.
- D. Ульянов В.В. Вводные лекции по квантовой механике. Часть 1-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2002. - 40 с.
- E. Ульянов В.В. Вводные лекции по квантовой механике. Часть 2-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2002. - 28 с.
- F. Ульянов В.В. Вступ до квантової кінетики. - Х.: ХНУ імені В.Н.Каразіна, 2004. - 164 с.
- G. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Новые квазиточнорешаемые модели в квантовой теории спиновых систем. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2005. - 124 с.
- H. Ульянов В.В. О квазиклассическом движении частиц в полях с особенностями. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2002. - 24 с.
- I. Ульянов В.В. Конспект вводных лекций по квантовой механике. Часть 3-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 52 с.
- J. Ульянов В.В. Конспект вводных лекций по квантовой механике. Часть 4-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 52 с.

- К. Ульянов В.В. Конспект лекций по квантовой статистике.
Часть 1-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 40 с.
- Л. Ульянов В.В. Конспект лекций по квантовой статистике.
Часть 2-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 40 с.
- М. Ульянов В.В. Вводные лекции по квантовой механике.
Часть 1-я. 2-е изд., доп. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011.
- 48 с.
- Н. Ульянов В.В. Вводные лекции по квантовой механике.
Часть 2-я. 2-е изд., доп. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011.
- 48 с.
- О. Ульянов В.В. Лекции по квантовой механике. Часть 5-я. - Х.:
ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 44 с.
- Р. Ульянов В.В. Сборник обзоров и статей по квантовой теории.
Ч. 1. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина,
2011. - 84 с.
- Q. Ульянов В.В. Сборник обзоров и статей по квантовой теории.
Ч. 2. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина,
2011. - 106 с.
- Р. Ульянов В.В. Сборник обзоров и статей по квантовой теории.
Ч. 3. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина,
2012. - 102 с.
- S. Ульянов В.В. Сборник обзоров и статей по квантовой теории.
Ч. 4. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина,
2012. - 66 с.
- T. Ульянов В.В. Сборник обзоров и статей по квантовой теории.
Ч. 5. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина,
2012. - 68 с.
- U. Ульянов В.В., Ульянов Н.В. Компьютерные исследования
квантовых явлений. Часть 1-я. - Х.: ХНУ им. В.Н.Каразина,
2012. - 208 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

ТАБЛИЦА УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ ЧЕТВЕРНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

n	e_n
0	1.06036209048418289964704601669
1	3.79967302980139416878309418851
2	7.45569793798673839215659134719
3	11.6447455113781620208503732814
4	16.2618260188502259378949544304
5	21.2383729182359400241497111136
6	26.5284711836825181918138281837
7	32.0985977109683266342721064383
8	37.9230010270339851465163785519
9	43.9811580972897307853181137528

ТАБЛИЦА СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ КВАДРАТОВ
 КООРДИНАТЫ, ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПРОНИКНОВЕНИЯ В
 КЛАССИЧЕСКИ НЕДОСТУПНУЮ ОБЛАСТЬ И
 ПРОИЗВЕДЕНИЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ИМПУЛЬСА И
 КООРДИНАТЫ ДЛЯ ЧЕТВЕРНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

n	$\langle z^2 \rangle_n$	w_n	$\Delta p_n \Delta z_n$
0	0.362022648789	0.0905370	0.50588
1	0.901605895819	0.0804080	1.51125
2	1.244714121511	0.0695577	2.48733
3	1.557909193537	0.0633403	3.47769
4	1.841609138522	0.0589319	4.46825
5	2.105010651065	0.0555763	5.45937
6	2.352866384212	0.0528950	6.45073
7	2.588299362716	0.0506796	7.44226
8	2.813476631178	0.0488032	8.43388
9	3.029980037256	0.0471835	9.42557

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

ТАБЛИЦА УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ ЛИНЕЙНОГО ПОТЕНЦИАЛА

n	e_n
0	1.01879297164747108901732478340
1	2.33810741045976703848919725245
2	3.24819758217983653787542377078
3	4.08794944413097061663698870146
4	4.82009921117873563940061626042
5	5.52055982809555105912985551293
6	6.16330735563948654763784353309
7	6.78670809007175899878024638450
8	7.37217725504777017709218227113
9	7.94413358712085312313828055580

ТАБЛИЦА СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ КВАДРАТОВ
 КООРДИНАТЫ, ВЕРОЯТНОСТЕЙ НАХОЖДЕНИЯ В
 КЛАССИЧЕСКИ НЕДОСТУПНОЙ ОБЛАСТИ И
 ПРОИЗВЕДЕНИЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ИМПУЛЬСА И
 КООРДИНАТЫ ДЛЯ ЛИНЕЙНОГО ПОТЕНЦИАЛА

n	$\langle z^2 \rangle_n$	w_n	$\Delta p_n \Delta z_n$
0	0.7498782680442	0.229158	0.50464
1	2.9155980068517	0.136237	1.50742
2	5.6886592932999	0.117460	2.48179
3	8.9127096841444	0.103859	3.48495
4	12.432616338198	0.096038	4.46939
5	16.254176434977	0.089486	5.46907
6	20.291840808441	0.084847	6.45665
7	24.565016906584	0.080742	7.45465
8	29.013261016820	0.077550	8.44375
9	33.658271173345	0.074642	9.44079

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

ПЕРЕЧЕНЬ ПРЕЗЕНТАЦИЙ, АНИМАЦИЙ, СТЕНДОВ И ДЕМОНСТРАЦИЙ СЛУЧАЙНЫХ СИТУАЦИЙ

Вначале дадим краткое описание соответствующих файлов, содержащихся на прилагаемом компакт-диске.

Презентации содержат рисунки, иллюстрирующие основной материал книги, картинки с экрана монитора во время показа анимаций, общий вид исследовательских стендов для интерактивного общения и другие материалы. Презентация к первому разделу более обширна (около 150 страниц), тогда как для других разделов презентации оказались скромнее (порядка 40 страниц каждая). Все презентации преобразованы в файлы с расширением pdf.

Анимационные демонстрации ведутся с помощью специально созданных авторских стендов, на которых имеются краткое содержание объекта изучения и элементы *управления* показом: регуляторы скорости (дискретные и непрерывные) и направления воспроизведения, а также окошки с отсчетом номеров кадров.

Стенды мы разработали для более детального *интерактивного* исследовательского общения пользователя с системами, обсуждаемыми в соответствующих разделах монографии.

Демонстрации случайных ситуаций позволяют наблюдать объекты при случайном выборе характерных параметров.

1. К первому разделу

Презентация «Степенные потенциалы.pdf».

Анимации

ANIM-V-10.exe. Непрерывный показ *профилей* и уровней энергии симметричных степенных потенциалов $u(z) = |z|^v$ для показателей степени от $v = 1/2$ до 10. Демонстрируется близость потенциалов к бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной 2 уже при $v \sim 10$.

ANIM-V-10-1000.exe. Аналогичная анимация для степенных потенциалов с большими показателями: v от 10 до 1000.

ANIM-V-2-2-2.exe. Перестройка трехъямного кусочно-квадратичного потенциала с формированием зачатков зонного энергетического спектра.

Далее в анимационных файлах первое число показывает вид максимума барьера, а второе – основной профиль ямок:

ANIM-V-1-1.exe. Непрерывная деформация кусочно-линейного симметричного потенциала $u(z) = |z_0 - |z||$ в форме буквы W в зависимости от параметра z_0 .

ANIM-V-1-2.exe. То же для кусочно-квадратичного симметричного потенциала $u(z) = (z_0 - |z|)^2$.

ANIM-V-2-2.exe. То же для дважды квадратичного симметричного потенциала $u(z) = (z_0^2 - z^2)^2$.

ANIM-V-4-2.exe. То же для четвертично-квадратичного симметричного потенциала $u(z) = (z_0^4 - z^4)^2$.

ANIM-V-2-4.exe. То же для квадратично-четвертичного симметричного потенциала $u(z) = z^4 - az^2$.

ANIM-V-12-12.exe. То же для кусочно-половинного потенциала в форме буквы W $u(z) = \sqrt{\left| \sqrt{z_0} - \sqrt{|z|} \right|}$.

2. Ко второму разделу

Презентация «Туннельное расщепление.pdf».

Анимации

TUN_SYM2с.exe. Наблюдается непрерывная деформация симметричного прямоугольного потенциала с туннельным расщеплением энергии в двухъямном случае, включая критические ситуации расположения энергетических щелей вблизи максимума потенциального барьера, разделяющего ямки. Наряду с потенциалом и уровнями энергии, в соседнем окне показаны либо волновые функции стационарных состояний, либо квадраты их модулей.

TUN_NSYM-3.exe. Аналогичная демонстрация создана для прямоугольного потенциала с ямками *разной ширины*, чтобы проследить на особенностями туннельного расщепления в несимметричном потенциальном поле

TUN_NSYM2с.exe. То же для несимметричного прямоугольного потенциала с ямками *разной глубины*.

ANIM-POT-с-d-1-1.exe. Непрерывная деформация кусочно-линейного несимметричного потенциала на интервале с непроницаемыми границами. Показано туннельное расщепление энергии в двухъямном случае, включая критические ситуации расположения энергетических щелей вблизи изломного максимума потенциального барьера, разделяющего ямки.

ANIM-POT-с-delta.exe. Наблюдается непрерывная деформация потенциального барьера в виде $a\delta(z)$ -функции в середине интервала с непроницаемыми границами $-c/2 < z < c/2$ при изменении параметра $a > 0$. Показана перестройка энергетического спектра.

ANIM-POT-с-delta-minus.exe. То же в случае потенциальной ямы ($a < 0$) в середине интервала $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-2delta.exe. Непрерывная деформация двойного потенциального барьера в виде двух $a\delta(z)$ -функций в середине интервала с непроницаемыми границами $-c/2 < z < c/2$ за счет параметра $a > 0$ с перестройкой энергетического спектра.

ANIM-POT-с-2delta-minus.exe. Аналогичная ситуация в случае двух потенциальных ям ($a < 0$).

ANIM-POT-с-gauss.exe. Непрерывная деформация потенциального барьера в виде гауссиана $a \exp(-z^2)$ в середине интервала с непроницаемыми границами $-c/2 < z < c/2$ за счет параметра $a > 0$. Показано изменение уровней энергии.

ANIM-POT-c-const.exe. Непрерывная деформация прямоугольного потенциального барьера в середине интервала с непроницаемыми границами $-c/2 < z < c/2$ за счет изменения высоты барьера. Показана перестройка энергетического спектра.

ANIM-POT-c-d-delta.exe. Перемещение потенциального барьера в виде $\delta(z-d)$ -функции на интервале с непроницаемыми границами $-c/2 < z < c/2$ за счет параметра d . Показана перестройка энергетического спектра.

ANIM-POT-c-d-gauss.exe. Аналогичная ситуация с перемещением потенциального барьера в виде гауссиана $a \exp[-(z-d)^2]$ на интервале с непроницаемыми границами $-c/2 < z < c/2$ за счет параметра d . Показана перестройка энергетического спектра.

ANIM-POT-c-d-const.exe. Перемещение прямоугольного барьера на интервале $-c/2 < z < c/2$ с непроницаемыми границами. Показана перестройка энергетического спектра.

ANIM-POT-v2-delta.exe. Деформация потенциала в виде комбинации $a\delta(z)$ -функции и параболической ямы за счет параметра $a > 0$. Показано изменение уровней энергии.

ANIM-POT-v2-gauss.exe. Аналогичная ситуация с деформацией потенциала в виде комбинации гауссиана $a \exp(-z^2)$ и параболической ямы за счет параметра $a > 0$. Показано изменение уровней энергии.

В следующих файлах, демонстрирующих поведение потенциалов на интервале с непроницаемыми границами, первое число показывает вид максимума барьера (1 – излом, 2 – квадратичный максимум, 4 – четверной максимум), а второе – профиль ямок у границы (12 – половинный, 1 – линейный, 2 – квадратичный, 3 – кубический, 4 – четверной, 6 – шестерной): ANIM-POT-с-1-12.exe. Непрерывная деформация линейно-половинного симметричного потенциального барьера на интервале с непроницаемыми границами при изменении параметра a : $u(z) = a\sqrt{c/2 - |z|}$, $-c/2 < z < c/2$. Показано туннельное расщепление энергии в двухъямном случае, включая критические ситуации расположения энергетических щелей вблизи максимума барьера, разделяющего ямки.

ANIM-POT-с-12-2.exe. То же для половинно-квадратичного потенциала $u(z) = a\left(\sqrt{c/2} - \sqrt{|z|}\right)^2$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-1-12.exe. То же для линейно-половинного потенциала $u(z) = a\sqrt{c/2 - |z|}$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-1-1.exe. То же для линейного симметричного потенциала $u(z) = a|c/2 - |z||$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-1-2.exe. То же для кусочно-квадратичного симметричного потенциала $u(z) = a\left(c/2 - |z|\right)^2$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-1-3.ехе. То же для кусочно-кубического симметричного потенциала $u(z) = a(c/2 - |z|)^3$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-1-4.ехе. То же для кусочно-четверного симметричного потенциала $u(z) = a(c/2 - |z|)^4$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-1-6.ехе. То же для кусочно-шестерного симметричного потенциала $u(z) = a(c/2 - |z|)^6$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-2-12.ехе. То же для квадратично-половинного симметричного потенциала $u(z) = a\sqrt{c^2/4 - z^2}$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-2-1.ехе. То же для квадратичного симметричного потенциального барьера $u(z) = a|c^2/4 - z^2|$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-2-2.ехе. То же для дважды квадратичного симметричного потенциала $u(z) = a(c^2/4 - z^2)^2$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-2-3.ехе. То же для квадратично-кубического симметричного потенциала $u(z) = a(c^2/4 - z^2)^3$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-2-4.ехе. То же для квадратично-четверного симметричного потенциала $u(z) = a(c^2/4 - z^2)^4$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-с-4-12.ехе. То же для четвертично-половинного симметричного потенциала $u(z) = a\sqrt{c^4/16 - z^4}$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-c-4-1.exe. То же для четверного симметричного потенциального барьера $u(z) = a \left| c^4 / 16 - z^4 \right|$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-c-4-2.exe. То же для четвертично-квадратичного потенциала $u(z) = a \left(c^4 / 16 - z^4 \right)^2$, $-c/2 < z < c/2$.

ANIM-POT-c-4-3.exe. То же для четвертично-кубического симметричного потенциала $u(z) = a \left| c^4 / 16 - z^4 \right|^3$, $-c/2 < z < c/2$.

3. К третьему разделу

Презентация «Спиновые потенциалы.pdf».

Анимации

ANIM-SPIN-POT-S2.exe. Наблюдение непрерывной деформации спинового симметричного потенциала для $S = 2$ в зависимости от параметра B . Показан переход от двухъямного профиля при малых B с туннельным расщеплением энергии, включая критическое расположение энергетических щелей вблизи квадратичного максимума барьера, к одной яме с четверным минимумом при $B = 2S + 1$ и далее к яме с простым минимумом.

ANIM-SPIN-POT-S2-2.exe. Аналогичная анимация с изменением скорости показа непрерывным образом.

ANIM-SPIN-POT-S1-BX-BZ.exe. Превращения
несимметричного спинового потенциала для $S = 1$ и $B_x = 1/30$ при изменении B_z .

ANIM-SPIN-ENERGY-S2-BX.exe. Структура спектра спинового потенциала с $S = 2$ в зависимости от параметра B_z при изменении B_x .

ANIM-SPIN-ENERGY-S2-BZ.exe. Структура спектра спинового потенциала с $S = 2$ в зависимости от параметра B_x при изменении B_z .

Стенды

SPIN-POT-SYMM-FORMS.exe. Построение симметричных спиновых потенциалов при непрерывном изменении параметра B для значений спина $S = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, 7/2$.

SPIN-POT-NONSYMM-FORMS.exe. То же для несимметричных спиновых потенциалов для значений спина $S = 0, 1/2, 1, 3/2$ при изменении параметров B_x и B_z .

4. К четвертому разделу

Презентация «Солитонные потенциалы.pdf».

Анимации

ANIM-3-SOLITON-FORMS.exe. Наблюдение за непрерывной деформацией трехуровневого солитонного симметричного потенциала и волновых функций стационарных состояний при изменении поочередно одного из уровней энергии.

ANIM-SOLITON-T-MOTION.exe. Деформация трехуровневого солитонного потенциала при изменении «квазивремени».

ANIM-3SOL-POT-DELTA.exe. Деформация трехуровневого солитонного потенциала при изменении фазовой добавки.

ANIM-V-1-1-invar-e0.exe. Непрерывная деформация кусочно-линейного несимметричного потенциала с постоянным уровнем энергии нулевых колебаний. Одновременно показано незначительное изменение 1-го возбужденного уровня.

ANIM-V-1-1-invar-e1.exe. То же с постоянной энергией 1-го возбуждения и незначительным изменением основного уровня.

ANIM-V-1-1-quasi-invar.exe. Непрерывная деформация кусочно-линейного несимметричного потенциала с почти неизменными уровнями энергии в рамках квазиклассического приближения на основе инвариантности периода классических колебаний.

ANIM-V-2-2-invar-e0.exe. Непрерывная деформация кусочно-квадратичного несимметричного потенциала с постоянным уровнем энергии нулевых колебаний. Одновременно показано незначительное изменение 1-го возбужденного уровня.

ANIM-V-2-2-invar-e1.exe. То же с постоянной энергией 1-го возбуждения и незначительным изменением основного уровня.

ANIM-V-2-2-quasi-invar.exe. Непрерывная деформация кусочно-квадратичного потенциала с почти неизменными уровнями энергии в рамках квазиклассического приближения на основе инвариантности периода классических колебаний.

ANIM-V-2-1-invar-e0.exe. Непрерывная деформация линейно-квадратичного несимметричного потенциала с постоянным

уровнем энергии нулевых колебаний. Одновременно показано незначительное изменение 1-го возбужденного уровня.

ANIM-V-2-1-invar-e1.exe. То же с постоянной энергией 1-го возбуждения и незначительным изменением основного уровня.

ANIM-V-1-1-ROTATION-1.exe. Непрерывная вращательная деформация кусочно-линейного потенциала с постоянным углом раствора $\varphi < \pi/2$ для наблюдения за уровнями энергии e_0 и e_1 .

ANIM-V-1-1-ROTATION-2.exe. То же при $\varphi = \pi/2$.

ANIM-V-1-1-ROTATION-3.exe. То же при $\varphi > \pi/2$.

ANIM-e0-invar-v4-v2.exe. Воспроизведение потенциала по волновой функции основного состояния с изменяющимся параметром a $\psi_0(z) = C \text{Exp}(-z^4/4 - az^2)$ при $e_0 \equiv 0$.

ANIM-e0-invar-v6-v4.exe. То же по заданной волновой функции основного состояния $\psi_0(z) = C \text{Exp}(-z^6 - az^4)$ при $e_0 \equiv 0$.

Стенды

SOLITON-STAND-16.exe. Стенд для реализации обратной задачи построения потенциалов по заданным уровням энергии. 16 примеров: 13 – зависимость уровней энергии от номера возбуждения по формулам в сравнении с соответствующим профилем, получаемым по квазиклассическим правилам квантования, 3 – по спиновым формулам в сравнении с профилем соответствующего эффективного потенциала.

3SOLITON-POT-FORMS-STAND.exe. Стенд для исследования различных форм трехсолитонных симметричных потенциалов в зависимости от двух параметров. Выделены области, где имеются минимумы или максимумы разных порядков.

2SOLITON-POTENTIALS.exe. С помощью регуляторов-ползунков с соответствующими шкалами выбираются два уровня энергии и параметр «квазивремя», для которых тут же строятся соответствующие потенциалы.

3SOLITON-POTENTIALS.exe. Аналогично выбираются три уровня энергии и параметр «квазивремя».

4SOLITON-POTENTIALS.exe. То же для четырех уровней энергии и «квазивремени».

Демонстрации случайных ситуаций

3SOL-RANDOM-POT-SYM.exe. Построение различных трехсолитонных симметричных потенциалов при случайном выборе параметров – уровней энергии.

3SOL-RANDOM-POT-NONSYM.exe. То же для несимметричных потенциалов при случайном выборе параметров – уровней энергии и «квазивремени».

4SOL-RANDOM-POT-SYM.exe. Построение различных четырехсолитонных симметричных потенциалов при случайном выборе параметров – уровней энергии.

4SOL-RANDOM-POT-NONSYM.exe. Аналогичное построение несимметричных потенциалов при случайном выборе параметров – уровней энергии и «квазивремени».

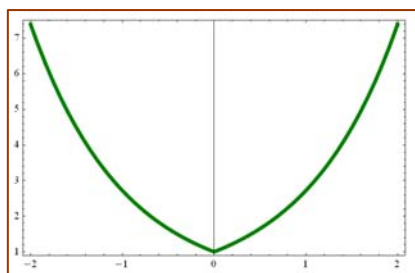
ПРИЛОЖЕНИЕ 4

СПИСОК ТЕМ, ПРОБЛЕМ, ВОПРОСОВ, ЗАДАЧ, ПРИМЕРОВ, ЯВЛЕНИЙ И Т. П., ОСТАВШИХСЯ ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ИССЛЕДОВАНИЯ

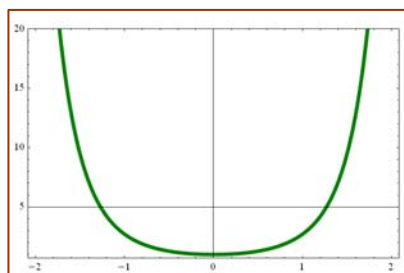
1. *Все зонные вопросы*, включая такое необычное явление, как *конечнозонность*, переносятся во второй том.
2. *Внесолитонность*: для ситуации с заданной областью непрерывного спектра и уровнями энергии можно построить потенциалы *не только* методом формирующей матрицы, как в случае генератора солитонных потенциалов: например, подобрать потенциал вида $-a\delta(z)$ с данным уровнем энергии.
3. Парадоксальная ситуация с вероятностями нахождения в классической области движения для основного и первого возбужденного состояния (см. рис.7) осталась без объяснения.
4. Серия аналогов степенных потенциалов вида $|sh(z)|^v$.
5. Расчеты уровней энергии и волновых функций для *внеспиновых* стационарных состояний.
6. Аналогичные расчеты для *надспиновых* стационарных состояний.
7. Расчеты ТР (туннельного расщепления энергии) в трехъямных потенциалах и т. д. (обращение к квазиклассическим формулам для N -ямных профилей – переход к зонным вопросам).

8. Расчеты ТР в трехпараболической структуре, которая демонстрируется в анимации ANIM-V-2-2-2.exe.
9. То же для ТР в аналогичных несимметричных формах.
10. Проблема *второго* квазиклассического приближения для степенных симметричных потенциалов с показателями степени $\nu < 2$, в частности ее решение для $\nu = 1$.
11. Явный вид формулы *третьего* квазиклассического приближения для правила квантования энергии.
12. Многие анимации, стенды и демонстрации случайных ситуаций созданы, чтобы привлечь внимание пользователя к интересным явлениям с целью их *дальнейшего исследования*.
13. Некоторые иллюстрации, помещенные в книгу (например, серии рис.17-24 и рис.25-26), не сопровождаются подробным обсуждением показываемых результатов, иначе объем монографии существенно увеличился бы. Однако это пища для размышлений и выводов любознательному читателю.
14. В некоторых местах книги явно указано, *что именно* читатель может исследовать *сам* (см. на страницах 63, 68, 71, 87, 92, 94, 142, 148, 168).
15. Наконец, в Приложении 5 собраны некоторые дополнительные виды потенциальных полей с целью привлечь внимание читателя к возможности самостоятельно исследовать свойства таких объектов.

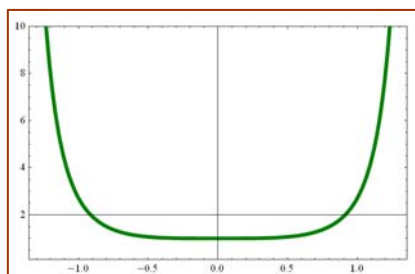
ПРИЛОЖЕНИЕ 5 НЕКОТОРЫЕ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ВИДЫ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПОЛЕЙ



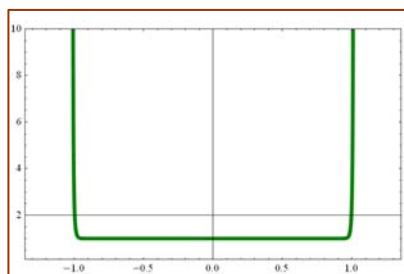
$$\exp(|z|)$$



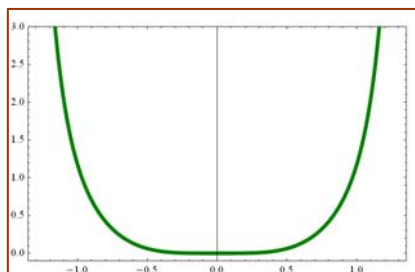
$$\exp(z^2)$$



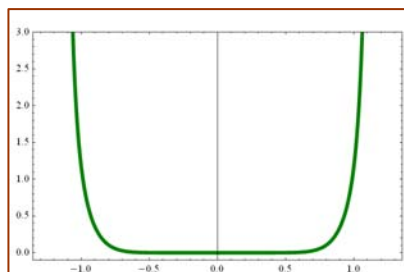
$$\exp(z^4)$$



$$\exp(z^{100})$$



$$\text{sh}(z^4)$$



$$\text{sh}(z^{10})$$

Рис. 38. Аналоги степенных симметричных потенциалов.

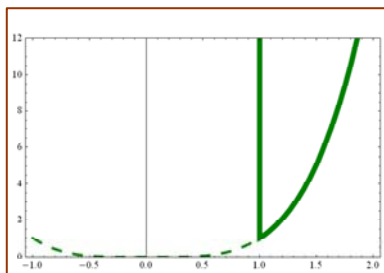
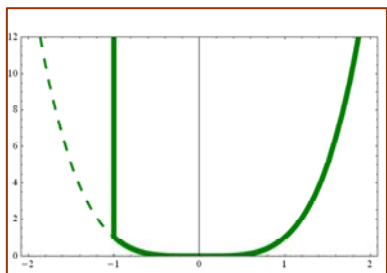
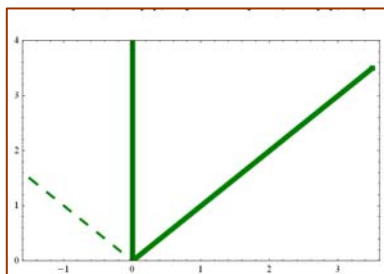
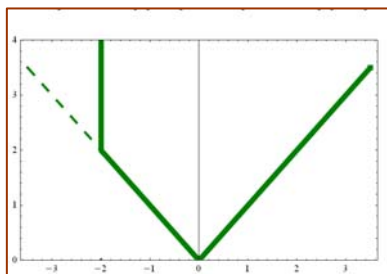
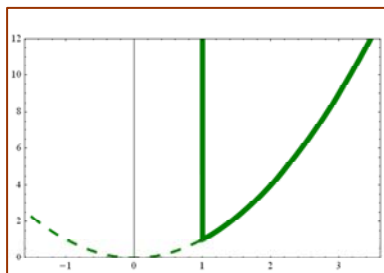
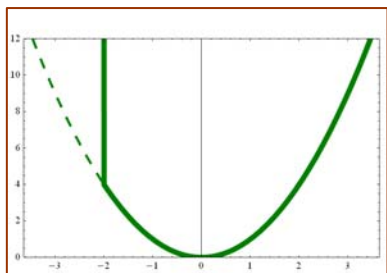
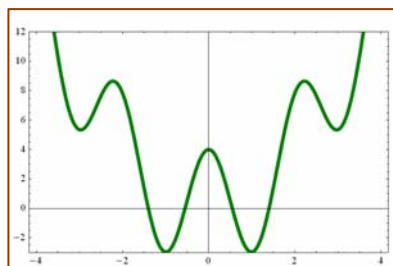
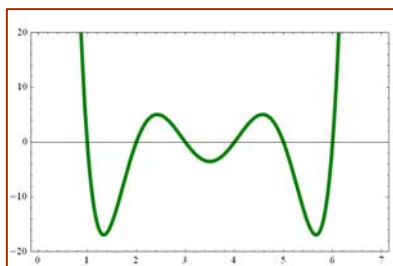
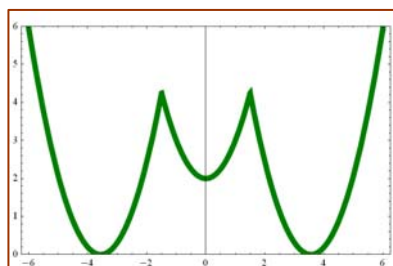
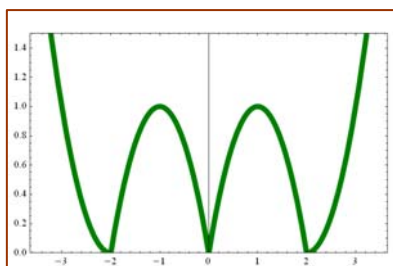
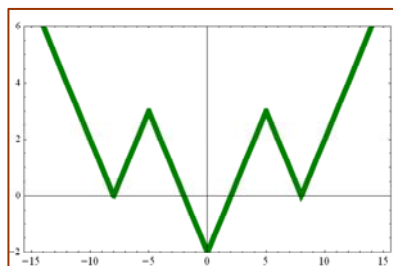
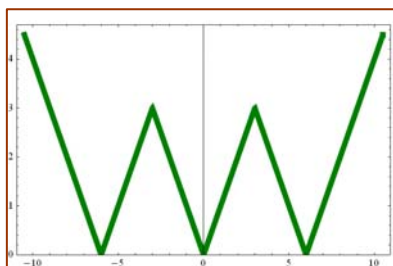


Рис.39. Квадратичный, линейный и четверной потенциалы с односторонними непроницаемыми границами.



$$(z-1)(z-2)(z-3)(z-4)(z-5)(z-6)$$

$$z^2 + 4 \cos(3z)$$

Рис.40. Примеры кусочно-линейных, кусочно-квадратичных и других потенциальных полей.

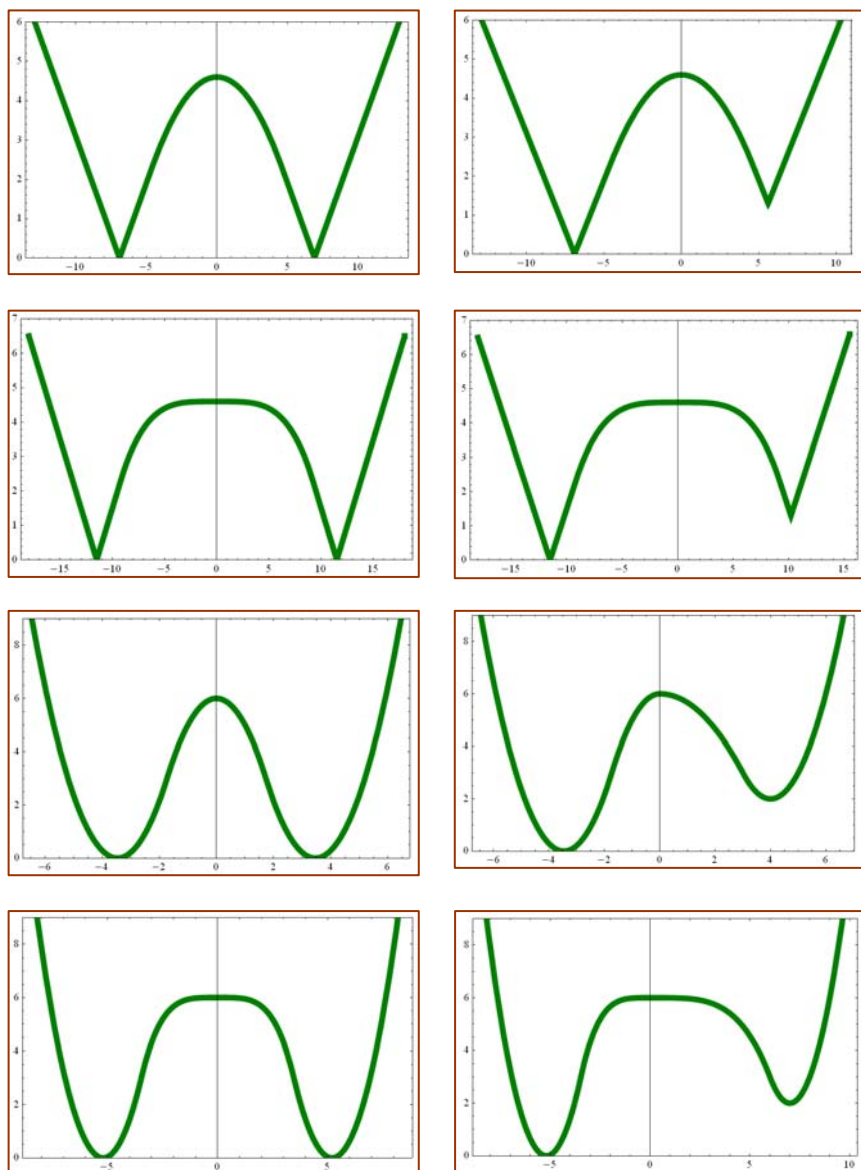


Рис.41. Двухъямные линейные и квадратичные потенциалы с квадратичными и четверными вершинами барьеров.

О С Н О В Н Ы Е

A – нормировочный множитель
 a – характерная длина;
 коэффициент
 B, b – коэффициент
 C – коэффициент
 c – интервал; вектор состояния в
 спиновом представлении
 D – дисперсия
 d – вспомогательная величина
 E, e – полная энергия системы
 F – формирующая матрица
 солитонного потенциала
 f – вспомогательная функция
 G, g – вспомогательная величина
 H – гамильтониан системы
 $\hbar = 2\pi\hbar$ – постоянная Планка
 i_n – вспомогательный интеграл
 j – вспомогательный номер
 k – вспомогательный номер;
 параметр
 L – длина
 m – масса частицы; номер
 N – число солитонов
 n – номер уровня энергии
 P – полином характеристического
 уравнения
 p – импульс частицы
 Q, q – коэффициент
 R – вспомогательная величина
 r – сферическая координата
 S, s – спин (кваспин, псевдоспин)
 T – коэффициент прозрачности
 t – квазивремя

О Б О З Н А Ч Е Н И Я

U, u – потенциальная энергия
 V – вспомогательная величина
 v – показатель степени потен-лов
 W, w – вероятность
 x – координата
 y – волновая функция; координата
 z – координата
 α – коэффициент; граничная фаза
 β – коэффициент
 γ – фазовая величина
 Δ – фазовая величина;
 энергетическая щель
 δ – фазовая добавка в солитонных
 потенциалах; относит. ошибка
 $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака
 ε – уровни энергии
 κ – энергетический параметр
 солитонного потенциала
 λ – вспомогательный параметр
 σ – квантовое число
 τ – квантовый период
 колебаний
 Φ – множитель волновой функции
 φ – фазовая добавка
 Ψ – волновая функция
 $\psi(x)$ – дигамма-функция
 ω – классическая частота
 осциллятора
 $ВФ$ – волновая функция
 $ПН$ – произведение
 неопределенностей

ПРЕДМЕТНЫЙ

Аналогия спин-солитонная 168
Ангармонический осциллятор
10, 13, 20, 81, 82, 92, 100
Анимационные демонстрации
3, 5, 20, 100, 171, 175
Безотражательность солитон-
ных потенциалов 155, 169, 170
Безразмерные величины 12, 18,
23, 32, 39, 114, 153
Вариационные методы 7, 48
Вириала теорема 50
Вириальные соотношения 21
Внеспиновые состояния 141
Волновые функции стационар-
ных состояний 9, 10, 17, 20, 45,
97, 128, 136, 138, 142, 147, 149,
150, 152, 155, 156, 163, 169, 171
Гамильтониан парамагнетика
125, 140, 144
Гармонический осциллятор 10,
17, 20, 23, 32, 82, 83, 124, 136
Двухъямные потенциалы 6, 8,
103, 109, 113, 116, 129, 142
Деформации спиновых
потенциалов 138, 139, 141, 142
Дисперсия 21, 22, 49, 51, 52, 56,
57, 60, 66, 67
Значение точных решений 6, 17
Инварианты в энергетических
спектрах 163, 165, 166, 167, 181

УКАЗАТЕЛЬ

Квазивремя 153, 154, 156, 166
Квазиклассическое
приближение 30, 39, 91, 164
Квазиточнорешаемость 5, 8,
102, 137, 138, 149, 151, 169, 170
Квантовые явления 3, 5, 8, 11,
25, 93, 101, 102, 113, 139, 173
Компьютерные методы 5, 7, 9,
150, 161, 163, 165, 171
Компьютерные стенды 175, 181
Критическая ситуация 3, 5, 8,
116, 123, 127, 134, 151, 172
Критический диапазон 44, 111,
121, 126, 128, 139, 169
Линейный потенциал 17, 119
Модели потенциалов
– кусочно-степенные 94, 96, 99
– несимметричные 92, 96, 99,
101, 103, 107, 112, 128, 133, 139,
144, 151, 154, 159, 164, 166, 169
– симметричные 11, 19, 21, 26,
30, 39, 48, 50, 66, 81, 92, 95, 98,
100, 103, 107, 113, 116, 128, 134
– солитонные 104, 126, 129, 136,
151, 155, 160, 162, 165, 168, 170
– спиновые 125, 131, 135, 137,
145, 149, 165, 168
– степенные 10, 22, 24, 26, 28,
30, 39, 48, 50, 60, 66, 70, 81, 86,
92, 98, 103, 150, 167

Надспиновые состояния 149, 168
 Неопределенность 6, 49, 51, 56
 Нулевые колебания 6, 23, 51,
 56, 61, 73, 77, 79, 84, 88, 92
 Обратная задача 5, 163, 167, 171
 Парамагнетик 125, 138, 140, 144
 Пробная функция 52, 57, 59, 62
 Произведение неопределенностей 24, 49, 52, 57, 75, 76, 100
 Расщепление энергетических уровней в потенциалах
 – симметричных 101, 103, 105, 112, 113, 114, 116, 128, 139, 151
 – несимметричных 93, 101, 102, 103, 107, 112, 128, 129, 134, 139
 Случайные ситуации 175, 181
 Солитонные потенциалы 5, 7, 9, 137, 152, 155, 157
 Соотношение неопределенностей 11, 21
 Спин 125, 138, 140, 142, 144, 146, 168
 Спиновые потенциалы 5, 8, 125, 131, 135, 137, 145, 149, 165, 168
 Спин-солитонная аналогия 168
 Спин-координатное соответствие 150, 170
 Стандартные модели потенциалов 136, 140, 149, 156
 Теория возмущений 82, 86, 88

Туннельное расщепление энергии 3, 5, 8, 93, 101, 102, 103, 116, 134
 Уравнение
 – Кортевега-де Фриза 9, 126, 136, 152, 168
 – Шрёдингера 12, 13, 18, 20, 104, 106, 128, 135, 147, 153, 168
 Фазовые параметры солитонных потенциалов 153, 156, 166
 Формирующая матрица солитонных потенциалов 154
 Функции Эйри 17, 72, 85, 106
 Четверной гиперболический осциллятор 146, 148
 Четверной степенной осциллятор 17, 20, 25, 27, 32, 38, 42, 53, 57, 59, 62, 68, 148
 Численные методы 7, 11, 13, 18, 20, 25, 63, 72, 81, 106, 124
 Энергетические параметры солитонных потенциалов 153, 156, 157, 158, 159, 161
 Энергетические уровни спиновых точных решений 125, 137, 138, 141, 148
 Энергетические щели 101, 104, 106, 109, 111, 117, 126, 134, 172
 Эффективные потенциалы 100, 131, 135, 137, 139, 144, 149, 166

СО Д Е Р Ж А Н И Е

ПРЕДИСЛОВИЕ.	3
ВВЕДЕНИЕ. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ С ДИСКРЕТНЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ	4
1. АНГАРМОНИЧЕСКИЕ КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯТОРЫ .	10
1.1. Степенные потенциальные поля	11
1.2. Численные методы решения уравнения Шредингера .	13
1.3. Квазиклассическое приближение.	30
1.4. Вариационные методы	48
1.5. Методы теории возмущений	82
1.6. Двухстепенные и несимметричные потенциалы . . .	93
1.7. Итоговые замечания по первому разделу	100
2. ТУННЕЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ	101
2.1. Расщепление в двухъямных потенциалах	103
2.2. Расщепление в симметричных случаях	114
2.3. Расщепление в несимметричных случаях	129
3. СПИНОВЫЕ ЭФФЕКТИВНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ	135
3.1. Квазиточнорешаемые модели	137
3.2. 4-гиперболический осциллятор	146
3.3. Значение спиновых потенциалов.	149

4. СОЛИТОННЫЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ПОЛЯ	152
4.1. Общие соотношения.	152
4.2. Конкретные примеры	157
4.3. Обратная задача восстановления потенциала по виду энергетического спектра. Инвариантность спектра . .	163
4.4. Аналогия между потенциальными полями спинного и солитонного происхождения	168
ПОСЛЕСЛОВИЕ	173
ЛИТЕРАТУРА.	174
ДОПОЛНЕНИЕ	175
Приложение 1. Данные для четверного осциллятора	177
Приложение 2. Данные для линейного потенциала	179
Приложение 3. Перечень анимаций, стендов, презентаций и демонстрационных файлов	181
Приложение 4. Темы, проблемы, вопросы, задачи, явления, оставшиеся для дальнейшего исследования	193
Приложение 5. Некоторые дополнительные виды потенциальных полей	195
ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ	199
ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ	200

Иллюстрации на последней странице обложки отражают этапы развития вычислительной техники последних поколений — так называемых персональных компьютеров.

Наукове видання

Володимир Володимирович Ульянов
Микола Володимирович Ульянов

КОМП'ЮТЕРНІ ДОСЛІДЖЕННЯ
КВАНТОВИХ ЯВИЩ
Частина перша

Монографія

Російською мовою

Відповідальний за випуск Г.І.Рашба

Підп. до друку 16.06.2012. Формат 60х84/16.
Папір офсетний. Друк ризографічний.
Умов. друк. арк. 9,2 . Тираж 100 пр. Ціна договірна.

Надруковано з готових оригінал-макетів у друкарні ФОП “Азамаєв В.Р.”
Свідоцтво про державну реєстрацію ВО2 № 229278 від 25.11.1998 р.
Свідоцтво про внесення суб'єкта визначеної справи до державного реєстру
видавців, виготівників і розповсюджувачів видавничої продукції.
Серія ХК № 135 від 23.02.05 р.

м.Харків, вул. Познанська 6, к. 84 тел. 8(057) 362-01-52

**Издания кафедры теоретической физики имени
академика И.М.Лифшица (вклад Ульяновых)**
К 200-летию Харьковского университета

Серия монографий и учебных пособий

1. В.В.Ульянов. ВСТУП ДО КВАНТОВОЇ КІНЕТИКИ. – 2004.
2. Ю.В.Василевская, В.В.Ульянов
НОВЫЕ КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ В
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ СПИНОВЫХ СИСТЕМ. – 2005.
3. Е.Н.Синельник, В.В.Ульянов
ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К ФИЗИКЕ(+CD). – 2005.
4. А.В.Лымарь, В.В.Ульянов. ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К
ФИЗИКЕ. Ч. 2 (+CD). – 2010.
5. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА НА ФИЗИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ
ХАРЬКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. Сост. В.В.Ульянов. – 2009.
6. В.В.Ульянов. О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ДВИЖЕНИИ
ЧАСТИЦ В ПОЛЯХ С ОСОБЕННОСТЯМИ. – 2002.
- 7,8. В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов. КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВА-
НИЯ КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ. Ч. 1, 2 (+CD). – 2012.
- 9,10,11,12. В.В.Ульянов. ВВОДНЫЕ ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ. Ч. 1, 2, 3, 4. – 2002, 2011.
- 13,14. В.В.Ульянов. КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ ПО КВАНТОВОЙ
СТАТИСТИКЕ. Ч. 1, 2. – 2011.
- 15,16. В.В.Ульянов. ВВОДНЫЕ ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ. Ч. 1, 2. Изд. 2-е, доп. – 2011.
17. В.В.Ульянов. ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ.
Ч. 5. – 2011.
- 18,19,20,21,22. В.В.Ульянов. СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ ПО
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ. Ч. 1, 2. – 2011; Ч. 3-5. – 2012.
23. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 1. – 2003.
24. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 2. – 2003.
25. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 3. – 2004.
26. А.М.Ермолаев, Н.В.Ульянов. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ
В НЕФЕРРОМАГНИТНЫХ ПРОВОДНИКАХ
С ПРИМЕСНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ЭЛЕКТРОНОВ. – 2006.
27. А.М.Ermolaev, N.V.Ulyanov. ELECTRON SPIN WAVES IN
NONMAGNETIC CONDUCTORS WITH RESONANCE STATES
OF ELECTRONS. – 2008.
28. О.М.Єрмолаєв, В.В.Ульянов. СТИСЛИЙ НАРИС ІСТОРІЇ
КАФЕДРИ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМЕНІ АКАДЕМІКА
І.М.ЛІФШИЦЯ. – 2008.

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний об ученых-физиках

1. В.В.Ульянов
ИЛЬЯ МИХАЙЛОВИЧ ЛИФШИЦ. – 2001, 2007(+DVD).
2. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
МОЙСЕЙ ИСААКОВИЧ КАГАНОВ. – 2001.
3. В.В.Ульянов. ЛЕВ ЭЛЕАЗАРОВИЧ ПАРГАМАНИК. – 2002.
4. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ЛЕОНИД СТЕПАНОВИЧ ГУЛИДА. – 2002.
5. В.В.Ульянов
БОРИС ИЕРЕМИЕВИЧ ВЕРКИН. – 2002.
6. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
АРНОЛЬД МАРКОВИЧ КОСЕВИЧ. – 2002.
7. В.В.Ульянов
ВИКТОР МОИСЕЕВИЧ ЦУКЕРНИК. – 2002.
8. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ВАЛЕНТИН ГРИГОРЬЕВИЧ ПЕСЧАНСКИЙ. 2002.
9. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ЭМАНУИЛ АЙЗИКОВИЧ КАНЕР. – 2002.
10. А.М.Ермолаев, Ю.П.Степановский, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР ИЛЬИЧ АХИЕЗЕР. – 2002.
11. В.В.Ульянов
АНДРЕЙ ВЛАДИМИРОВИЧ ЖЕЛЕХОВСКИЙ. – 2003.
12. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ВЛАДИМИР ПЕТРОВИЧ ГАЛАЙКО. – 2003.
13. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ИГОРЬ ИВАНОВИЧ ФАЛЬКО. – 2003.
14. Г.И.Рашба, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР МИХАЙЛОВИЧ ЕРМОЛАЕВ. – 2003.
- 15.
16. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ОЛЕГ ИВАНОВИЧ ЛЮБИМОВ. – 2005.
17. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ. – 2008.
18. В.В.Ульянов. ВОСПОМИНАНИЯ ФИЗИКА-ТЕОРЕТИКА. Ч.1. – 2008.
19. В.В.Ульянов. К 95-ЛЕТИЮ Л.Э.ПАРГАМАНИКА. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ (2-е изд., доп.). – 2010.
21. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов. М.И.КАГАНОВ В ХГУ. – 2011.
22. В.В.Ульянов. К 90-ЛЕТИЮ М.И.Каганова. – 2011 (CD).
23. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов. В.Г.ПЕСЧАНСКИЙ НА ТЕОРКАФЕДРЕ. – 2011.
24. В.В.Ульянов. К 80-ЛЕТИЮ В.Г.ПЕСЧАНСКОГО. – 2011 (CD).

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний о Детях физмата

1. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ИВАНОВИЧ ШАРАПОВ. – 2002, 2007.
2. В.В.Ульянов. НА УНИВЕРСИТЕТСКОЙ. – 2002, 2007.
3. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ГАВРИЛОВИЧ
КЛАДКОВОЙ (Мой друг Толька). – 2002, 2007(CD).
4. ЛЕГЕНДЫ И БЫЛИ СТАРОГО ФИЗМАТА
 - Ч.I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Дзюба А.С.,
Перваков В.А., Сизова З.И., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч.II. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С.,
Гапон Э.В., Иванов И.Г., Кондратьев Б.В., Мерисов Б.А.,
Ульянов В.В., Хижковский В.П., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч.III. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С.,
Козинец В.В., Кондратьев Б.В., Николаев Г.Т.,
Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч.IV. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П.,
Мерисов Б.А., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2002.
 - Ч.V. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Валиев Б.М.,
Гребенник И.П., Мерисов Б.А., Сизова З.И., Ульянов В.В. - 2002.
 - Ч.VI. Сборник рассказов. Барьяхтар В.Г., Гребенник И.П.,
Креснин А.А., Манжелей В.Г., Пустовалов В.В.,
Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.VII. Сборник стихов. Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А.,
Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И., Степановский Ю.П.,
Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2003.
 - Ч.VIII. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Тартаковский В.К.,
Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.IX. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П.,
Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003..
 - Ч.X. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Ульянов В.В.,
Хижковский В.П., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.XI. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Кан Я.С., Николаев Г.Т.,
Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Шарапов А.И., Яцук К.П.,
Яцук Л.П. - 2003.
 - Ч.XII. Сборник рассказов. Боярский Л.А., Гребенник И.П.,
Малеев В.Я., Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2004.
 - Ч.XIII. Сборник рассказов. Ковинько Н.М., Мазель Е.З.,
Ривкина Э.М., Розенберг В.Я., Тартаковский В.К., Ульянов В.В.,
Шарапов А.И. - 2008.
 - Ч.XIV. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Евланов М.В., Кан Я.С.,
Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А., Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И.,
Степановский Ю.П., Таранова Г.М., Ульянов В.В., Шарапов А.И.,
Яцук К.П., Яцук Л.П. - 2009.
 - Ч.XV. Сборник рассказов. Креснин А.А., Ульянов В.В.,
Федченко Л.Ю., Хайтман Е.Н., Яровая Р.Г. - 2009.
 - Ч.XVI. Сборник рассказов. Рофе-Бекетов Ф.С., Татарченко Л.П.,
Ульянов В.В. – 2009.
5. В.В.Ульянов. КАК МЫ ПРАЗДНОВАЛИ 50-ЛЕТИЕ
ОКОНЧАНИЯ УНИВЕРСИТЕТА (+CD). – 2007.

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний о жизни в XX веке

1. В.В.Ульянов. Д О В О Й Н Ы (1934-1941). – 2002.
2. В.В.Ульянов. В О Е Н Н Ы Е Г О Д Ы (1941-1945). – 2002.
3. В.В.Ульянов. В Ш К О Л Е (1945-1952). – 2002.
4. В.В.Ульянов
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1934-1950). – 2003.
5. В.В.Ульянов
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1951-1954). – 2003.
6. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1955-1957). – 2003.
7. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1958-1961). – 2003.
8. В.В.Ульянов. Д В А Д Н Я В А Л У Ш Т Е. – 2003.
(Волейбольные грёзы)
9. В.В.Ульянов. Д В А Д Ц А Т Ы Й Д О М. – 2003.
10. В.В.Ульянов. 5 0 Л Е Т С П У С Т Я. – 2003.
11. В.А.Ульянов
ВОСПОМИНАНИЯ ДЕТСТВА И ЮНОСТИ. – 2003.
12. В.А.Ульянов. МОЯ ПОЕЗДКА В США И ОБРАТНО. – 2003.
13. В.А.Ульянов. С Т Р А Н И Ч К И Ж И З Н И. – 2003.
14. В.В.Ульянов
РОДОСЛОВНАЯ НАШЕЙ СЕМЬИ. – 2004.
15. В.В.Ульянов. ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ. – 2004.
16. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1962-1967)+CD. – 2006.
17. В.В.Ульянов. ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ (2-е изд., доп.). – 2007.
18. В.В.Ульянов. ВИКТОР ЕВГЕНЬЕВИЧ РУБАНОВИЧ (+CD). – 2008.
19. В.В.Ульянов. НОВОЕ О ПУШКИНЕ И ГОГОЛЕ. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ИЗДАНИЯ. ВЫСТАВКА КНИГ. – 2009 (CD).
21. Н.В. и И.П.Ульяновы. ЧЕРНОГОРИЯ. ИЮЛЬ 2009. – 2009 (CD).
22. Н.В.Ульянов, И.П.Ульянова. ПО ЮГУ ЕВРОПЫ. – 2009 (CD).
23. В.В.Ульянов. К 150-ЛЕТИЮ А.П.ЧЕХОВА. – 2010 (CD).
24. В.В.Ульянов. К 170-ЛЕТИЮ П.И.ЧАЙКОВСКОГО. – 2010 (CD).
25. Н.В. и И.П.Ульяновы. БОЛГАРИЯ И РУМЫНИЯ. – 2010 (CD).
26. В.В. и Н.В.Ульяновы. МИСХОР – АВГУСТ 2010. – 2010 (CD).
27. В.В.Ульянов. К 110-летию В.А.Ульянова. Рисунки отца. – 2011 (CD).
28. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ПАВЛОВИЧ ЗАВАЛИШИН. – 2011 (CD).
29. В.В. и Н.В.Ульяновы. МИСХОР – ИЮЛЬ 2011. – 2011 (CD).
30. В.В.Ульянов. МОЯ МУЗЫКАЛЬНАЯ ИСТОРИЯ (+DVD). – 2013.
31. В.В.Ульянов. ФИЛЬМЫ МОЛОДОСТИ НАШЕЙ (+DVD). – 2013.
32. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова. РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ
ОТДЫХЕ (1968-1973)+DVD. – 2013.
33. В.В.Ульянов. ВОСПОМИНАНИЯ ФИЗИКА-ТЕОРЕТИКА. Ч.2. –
2013.

